

Факультет биоинженерии и биоинформатики,
Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова



Молекулярный визуализатор PyMol

Биоинформатика, 4 курс ФББ МГУ, осенний семестр
Злобин А. С., alexander.zlobin@fbb.msu.ru

Визуализаторы

Больше для анализа

VMD

trajectories

scripting

NGLview

jupyter scripting

Mol* viewer

web

PyMol

scripting

rendering

Chimera

rendering

BioBlender

rendering

UnityMol

rendering

Больше для иллюстраций

Чаще всего визуализаторы используют для, очевидно, **визуального анализа** и для **подготовки изображений** публикационного качества. Для глубокого анализа приходится использовать специализированные инструменты или плагины.

Допбаллы: разберите один из инструментов помимо PyMol и напишите по нему tutorial на русском языке, понятный вашим текущим и будущим коллегам.

plugin for pymol

Advanced Create alert Create RSS User Guide

Sorted by: Best match

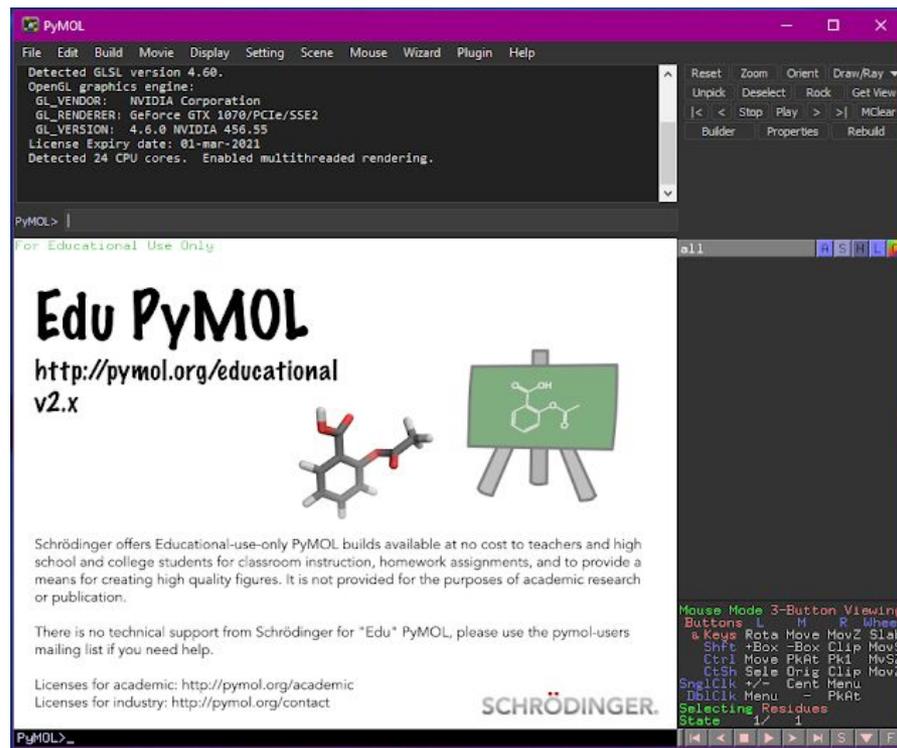
77 results

- Azahar: a PyMOL plugin for construction, visualization and analysis of glycan molecules.**
 1
 Cite Arroyuelo A, Vila JA, Martin OA.
 J Comput Aided Mol Des. 2016 Aug;30(8):619-24. doi: 10.1007/s10822-016-9944-x. Epub 2016 Aug 22.
 Share PMID: 27549814
 Azahar is implemented in Python and works as a **plugin** for the well known **PyMOL** package (Schrodinger in The **PyMOL** molecular graphics system, version 1.3r1, 2010). Besides the already available visualization and analysis options provided by **PyMOL**, Azahar ...
- PyTMs: a useful PyMOL plugin for modeling common post-translational modifications.**
 2
 Cite Warnecke A, Sandalova T, Achour A, Harris RA.
 BMC Bioinformatics. 2014 Nov 28;15(1):370. doi: 10.1186/s12859-014-0370-6.
 Share PMID: 25431162 **Free PMC article.**
 CONCLUSION: PyTMs is a useful, user-friendly modelling **plugin** for **PyMOL**. Advantages of PyTMs include standardized generation of PTMs, rapid time-to-result and facilitated user control. ...PyTMs is freely available as part of the **PyMOL** script repository projec ...
- iPBAvizu: a PyMOL plugin for an efficient 3D protein structure superimposition approach.**
 3
 Cite Faure G, Joseph AP, Craveur P, Narwani TJ, Srinivasan N, Gelly JC, Rebehmed J, de Brevern AG.
 Source Code Biol Med. 2019 Nov 2;14:5. doi: 10.1186/s13029-019-0075-3. eCollection 2019.
 Share PMID: 31700529 **Free PMC article.**
 To facilitate the usage of iPBA, we designed and implemented iPBAvizu, a **plugin** for **PyMOL** that allows users to run iPBA in an easy way and analyse protein superimpositions. CONCLUSIONS:

Больше возможностей для анализа в PyMol

Установка PyMol

1. Пройти на www.pymol.org
2. Нажать на **Download Now**
3. Выбрать нужную ОС
4. Установить
5. Вернуться на сайт, нажать на **Buy Licence**, выбрать **Student/Teacher**
6. **Лицензия приходит на почту в течение пары дней**
7. Скачать файл лицензии, указать к нему путь при запуске PyMol (или в любое другое время **Help -> Install new License File**)



Загрузка молекулы

File > Open	Откроет файл формата pdb, cif (структуры), dsn6, csp4, mtz (электронные плотности)
File > Get PDB	Скачает и откроет структуру и (опционально) электронную плотность

Get PDB File

Note: Downloading will save the files in the directory defined by the "fetch_path" setting.

PDB ID: 4 letter PDB code

PDB Structure Object name (opti...
 2FoFc Map Object name (opti...
 FoFc Map Object name (opti...

PDB Structure Options

Chain name (optional):
Assembly (optional):

This will run the following command

Download

Идентификатор PDB

Как будет называться объект внутри PyMol, содержащий информацию о координатах атомов из PDB ID 6XMK

Можно скачать только какую-то одну цепь

Можно скачать **биологическую сборку (assembly)**. Вкратце, это способ существования этой структуры в реальности. Подробнее см. следующий практикум.

Загрузка молекулы (CLI)

<code>fetch 6XMK</code>	Скачает 6XMK.cif* в папку, откуда запущен rutil, загрузит информацию о координатах в объект <code>bxmk</code>
<code>fetch 6XMK, my_protein</code>	То же, но имя объекта будет <code>my_protein</code>
<code>fetch 6XMK, type=pdb1, multiplex=1</code>	Вместо асимметрической единицы скачает и загрузит биологическую сборку
<code>set assembly, 1</code> <code>fetch 6XMK</code>	
<code>fetch 6XMK, type=2fofc</code>	Скачает карту электронной плотности** в формате <code>ssr4</code> , загрузит в объект <code>bxmk_2fofc</code>
<code>load <path_to_file>, <some_name></code>	Загрузит информацию из файла в объект с именем <code>some_name</code> , тип информации попытается распознать из расширения файла

* cif это более новый стандарт для депонирования структур, он более гибкий, чем `pdb`, но сложен для чтения человеком

** Вы так же можете указать `fofc`. Что вообще значат эти буквы и что за информация содержится в `fofc` карте вы узнаете на лекции про комбинированные синтезы Фурье

Камера

Приблизить: зажать ПКМ + тянуть мышь на себя

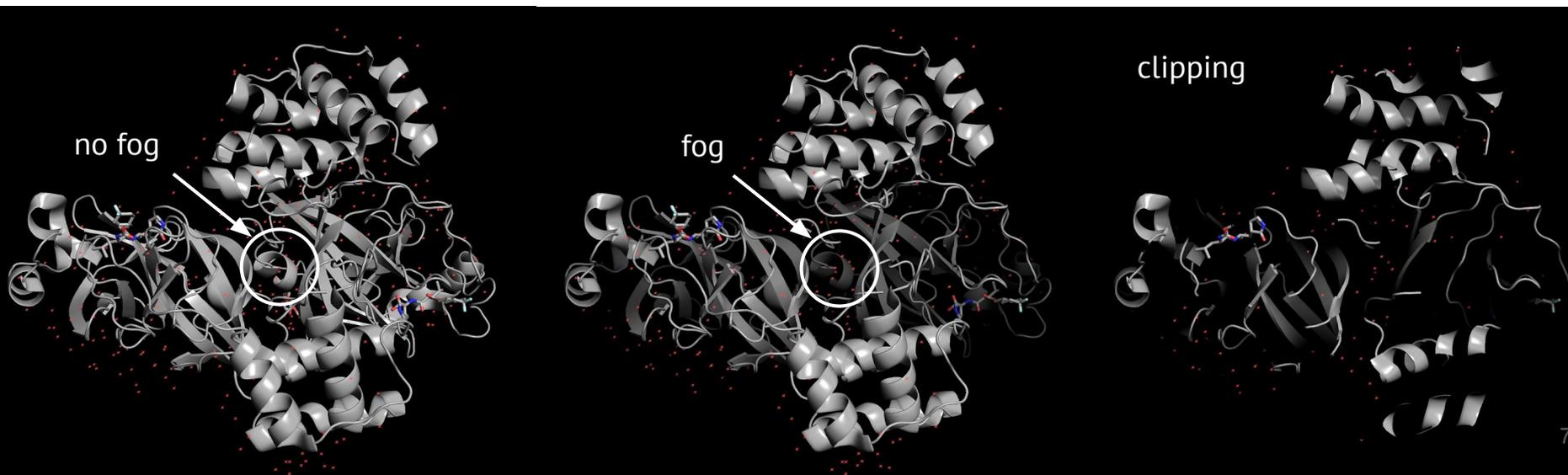
Отдалить: зажать ПКМ + тянуть мышь от себя

Вращение вокруг якорной точки: зажать ЛКМ + водить мышью

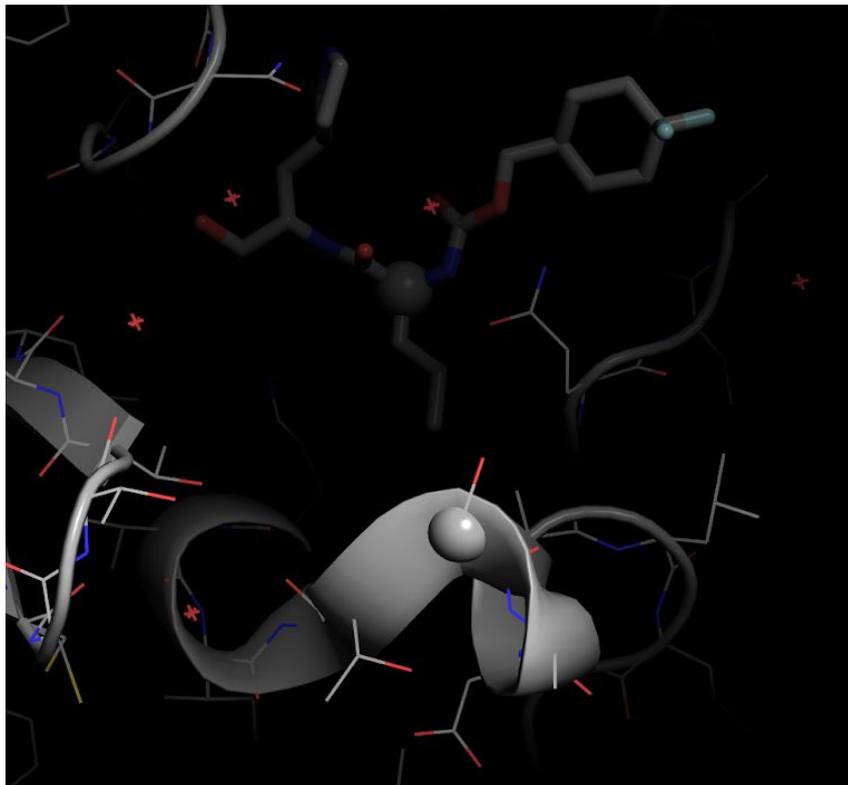
Перемещение камеры: зажать СКМ + водить мышью

Близость clipping plane и точки начала “тумана” (fog) к якорной точке: колесико

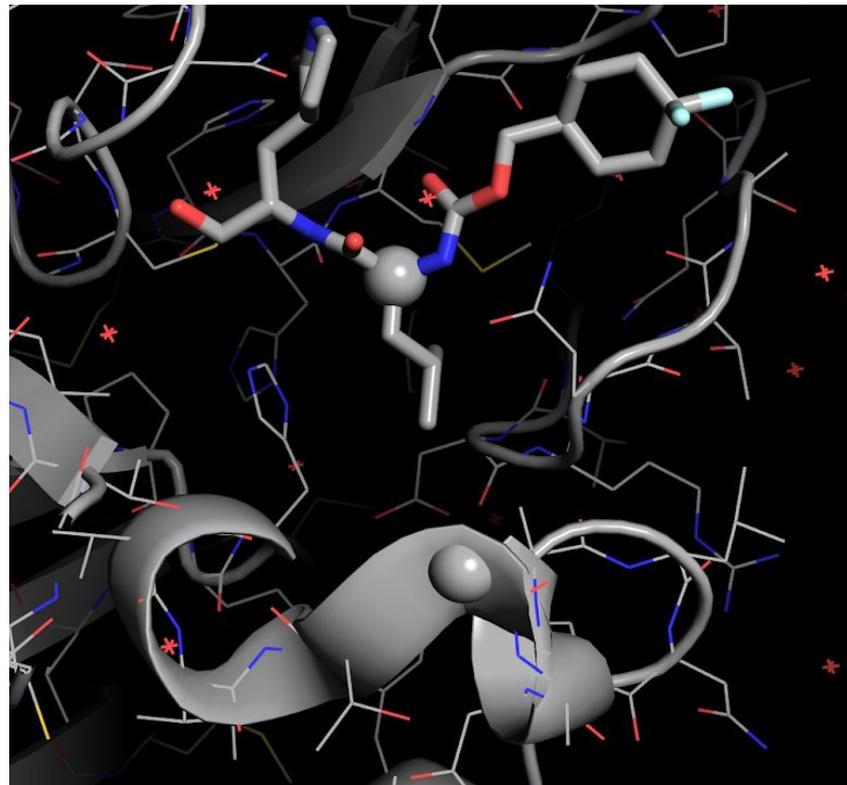
Изменить якорную точку: щелчок СКМ по любому атому



Камера



Якорная точка
на ближней сфере



Якорная точка
на дальней сфере

Сохранить понравившийся ракурс

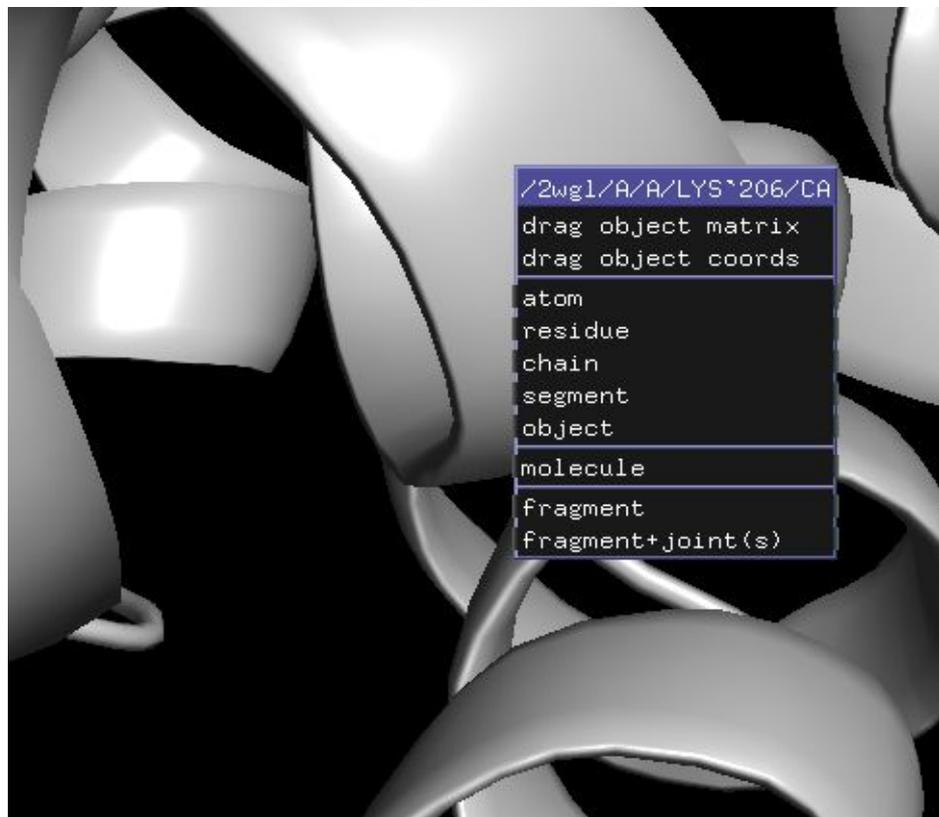
Ctrl+F{1-12} сохраняет ракурс под номером 1-12. Вернуться к нему можно в любой момент нажатием **F{1-12}** соответственно

Если забыли сочетания мыши и клавиатуры

Подсказка по управлению камерой всегда располагается в нижнем правом углу:



Правая кнопка мыши: информация об атоме



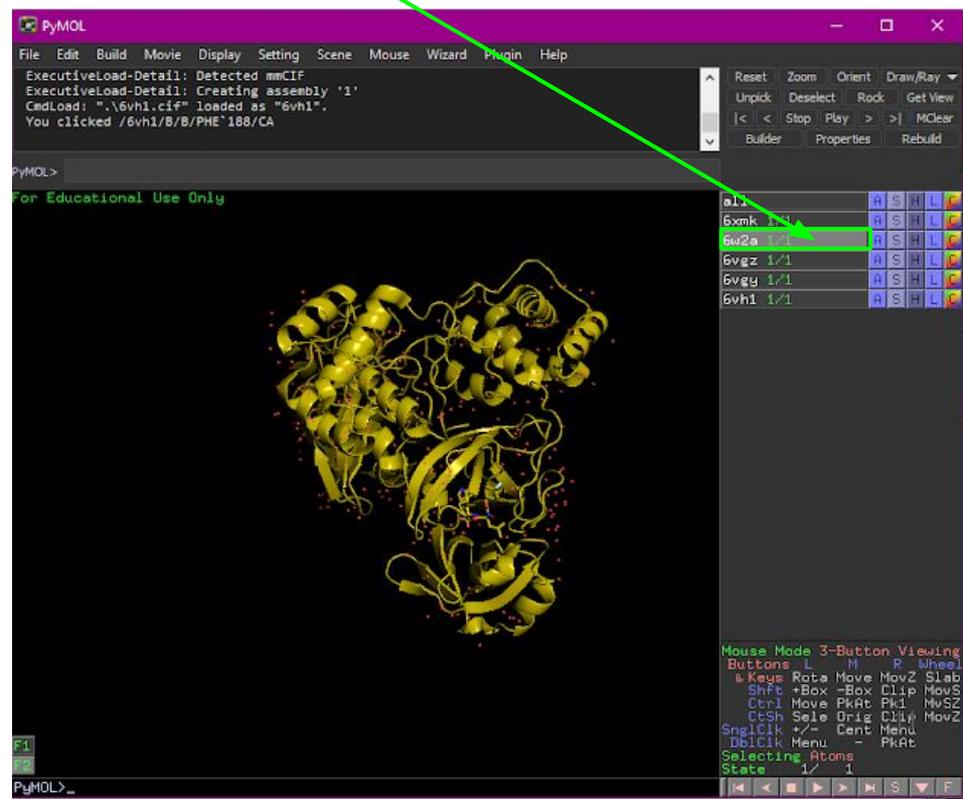
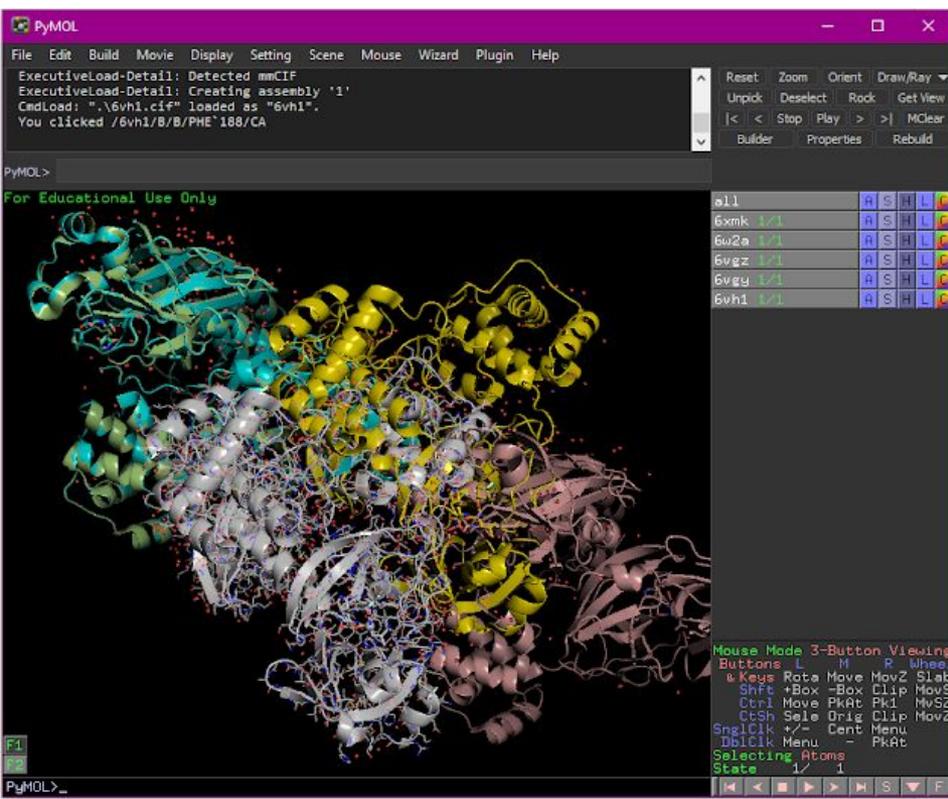
Щелчок правой кнопкой мыши по атому выведет контекстное меню с информацией об остатке и атоме, слева направо:

- Объект
- Сегмент
- Цепь
- Имя остатка
- Номер остатка
- Имя атома

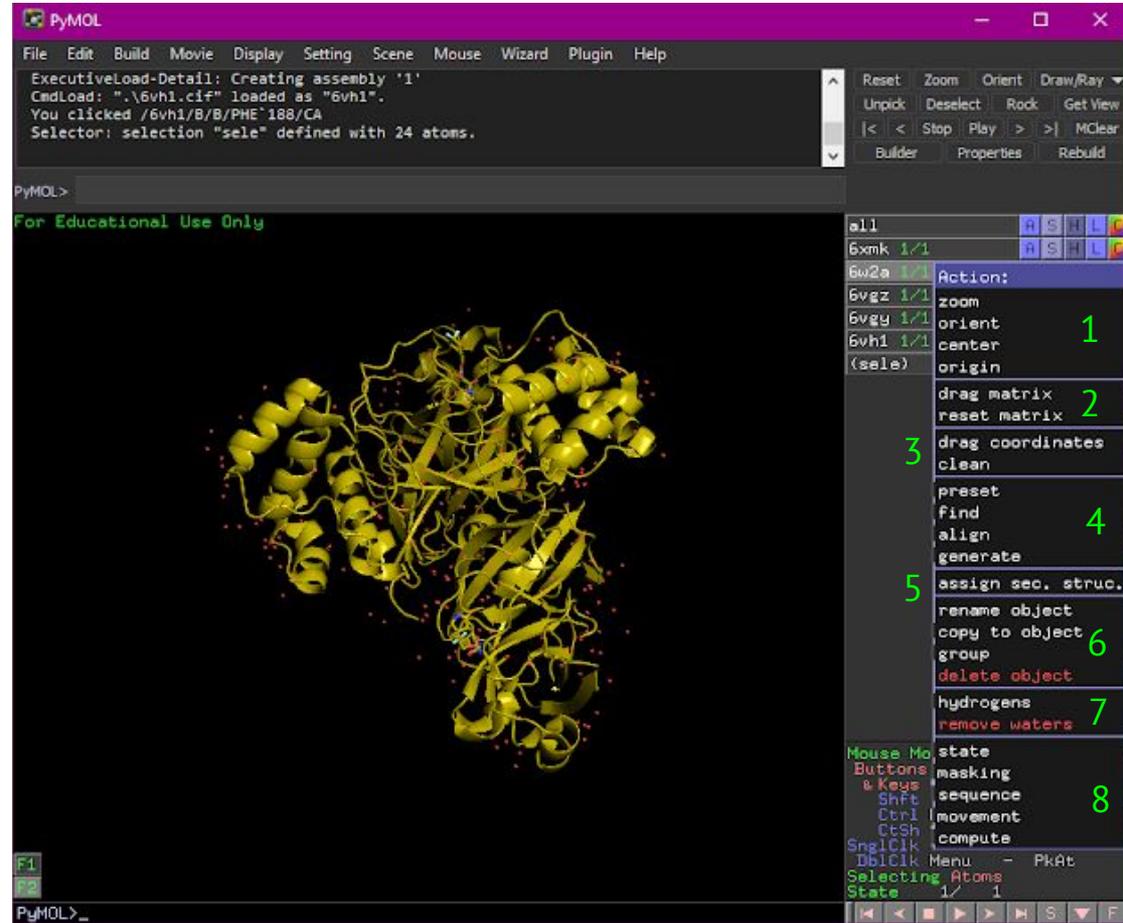
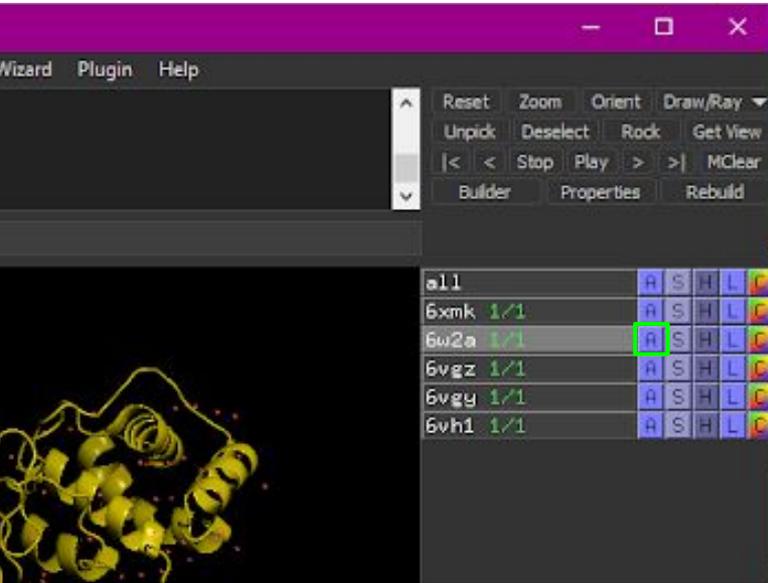
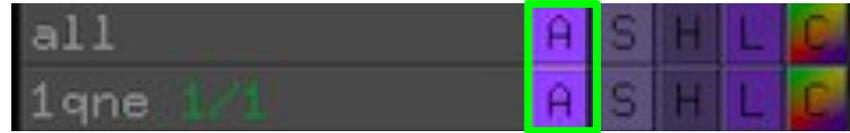
Объекты

Можно одновременно работать с несколькими объектами.

Включить/выключить отображение: щелчок по



Действия



Большинство имеют очевидные названия. Нам в курсе потребуются блоки команд 1, 4, 5, 6, 7

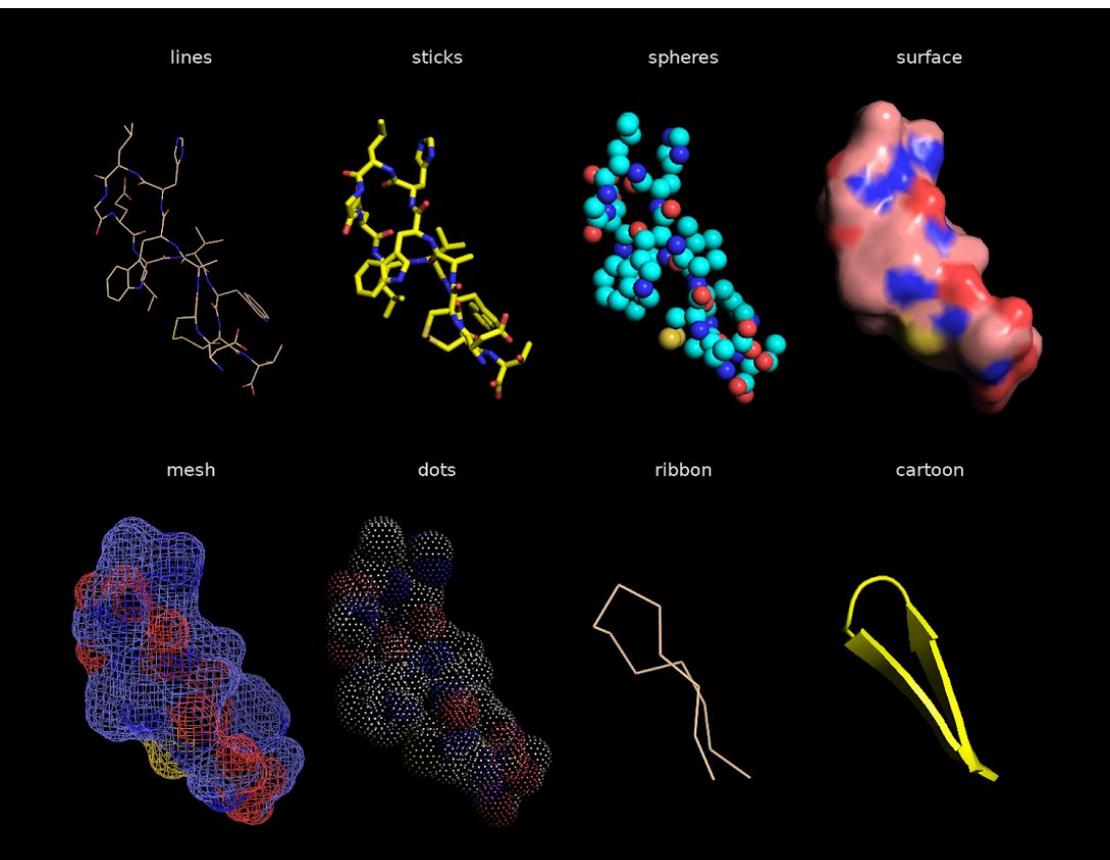
Отображения



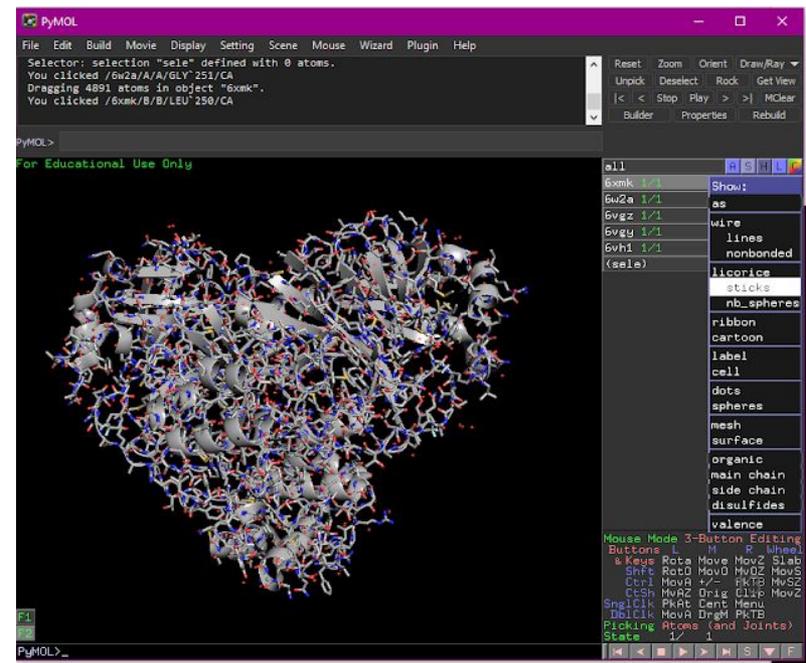
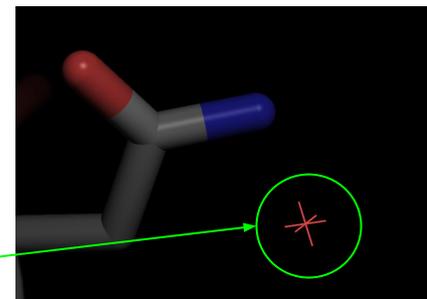
Включить

Выключить

Выберите Wizard > Demo > Representations для наглядной демонстрации всех типов отображений в PyMol (кроме nonbonded).



Nonbonded
вода



Подписи

all	A	S	H	L	C
1qne 1/1	A	S	H	L	C

Раскраска

all	A	S	H	L	C
1qne 1/1	A	S	H	L	C

Полезные варианты помимо одноцветных:

by element красит все элементы, кроме C, в их цвета по умолчанию. Цвет для C можно выбрать из списка.

by chain удобен для быстрого визуального различения цепей

spectrum > rainbow позволяет визуально проследить за ходом цепи от N к C концу

spectrum > b-factors делает раскраску по B-фактору в цветовой схеме по умолчанию. Если хочется другую, см. дальше покраску с помощью команд.

Выделения

Можно задавать отображение и расцветку не всему объекту, а только отдельным его частям. Для этого нужно использовать выделения. Простейший способ задать выделение – щелкнуть левой кнопкой мыши по атому.

```
Mouse Mode 3-Button Viewing
Buttons L M R Wheel
& Keys Rota Move MovZ Slab
Shft +Box -Box Clip MovS
Ctrl +/- PkAt Pk1 MvSZ
CtSh Sele Orig Clip MovZ
SnglClk +/- Cent Menu
Db1Clk Menu - PkAt
Selecting Residues
State 1/ 1
```

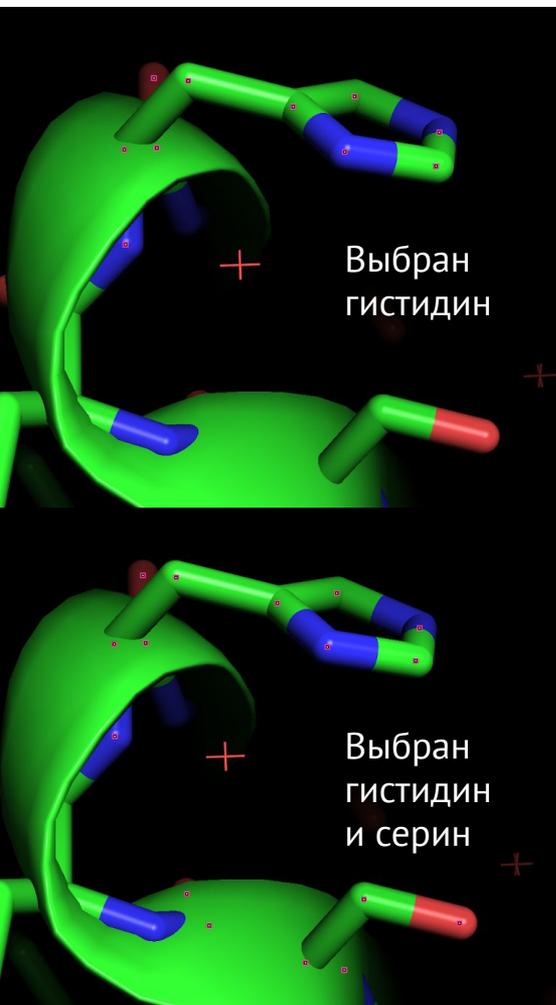


Режим Mouse Mode: Viewing задает возможность выделять (щелкните по строчке “3-Button Viewing”, чтобы посмотреть, какие еще есть режимы)

Режим Selecting определяет, что выделяется при щелчке по атому. Щелкните по строчке “Residues”, чтобы посмотреть, какие у вас есть опции

Щелчок по другому атому добавляет его (или весь остаток, если выбрано Selecting Residues) в выделение. Щелчок по атому, который уже находится в выделении, исключает его из выделения.

Выделения



Маленькие квадраты показывают, что находится в активном выделении

Активное выделение появляется в меню справа и называется **sele**. Вы заметите, что к названию добавлены скобки, чтобы отличить выделение от объекта. Чтобы иметь несколько сохраненных выделений, можно переименовать sele: **A > rename selection**, тогда все, что будет выбрано мышью потом, будет помещаться уже в новый sele.

Альтернативно можно воспользоваться командной строкой:

```
select <selection_name>, <selection_expression>
```

Например, чтобы сохранить то, что мы выбрали мышью:

```
select his_and_ser, sele
```

С выделениями можно работать так же, как с объектами.

Полезный минимум

resi X	Все атомы в остатках с номером X
resn X	Все атомы в остатках с именем X
chain X	Все атомы в цепи X
name X	Все атомы с именем X
id X	Все атомы с номером X
X	Объект или выделение с именем X
alt X	Все атомы, принадлежащие альтлоку X
ss X	Все атомы во вторичной структуре определенного типа: S бета-лист, H альфа-спираль, L+ все остальное
backbone	Все атомы остова
sidechain	Все атомы боковых радикалов
perseq X	Атомы, принадлежащие пептидной последовательности X (в однобуквенном коде)

byres X	Расширить выделение X до целых остатков. Есть и другие "by"-модификаторы, см. Wiki
X within Y of Z	Элементы выделения X в радиусе Y от любого элемента выделения Z

А также hydrogens, metals, polymer.protein, polymer.nucleic и еще много всего полезного.

Полный список по надобности смотреть тут:

https://pymolwiki.org/index.php/Selection_Algebra

Выражения можно комбинировать с помощью **скобок** и **and, or, not**

Также полезно использовать + и -. Так, выражение `resi 10+33-36+40-42`

эквивалентно

`resi 10 or resi 33 or resi 34 or resi 35 or resi 36 or resi 40 or resi 41 or resi 42`

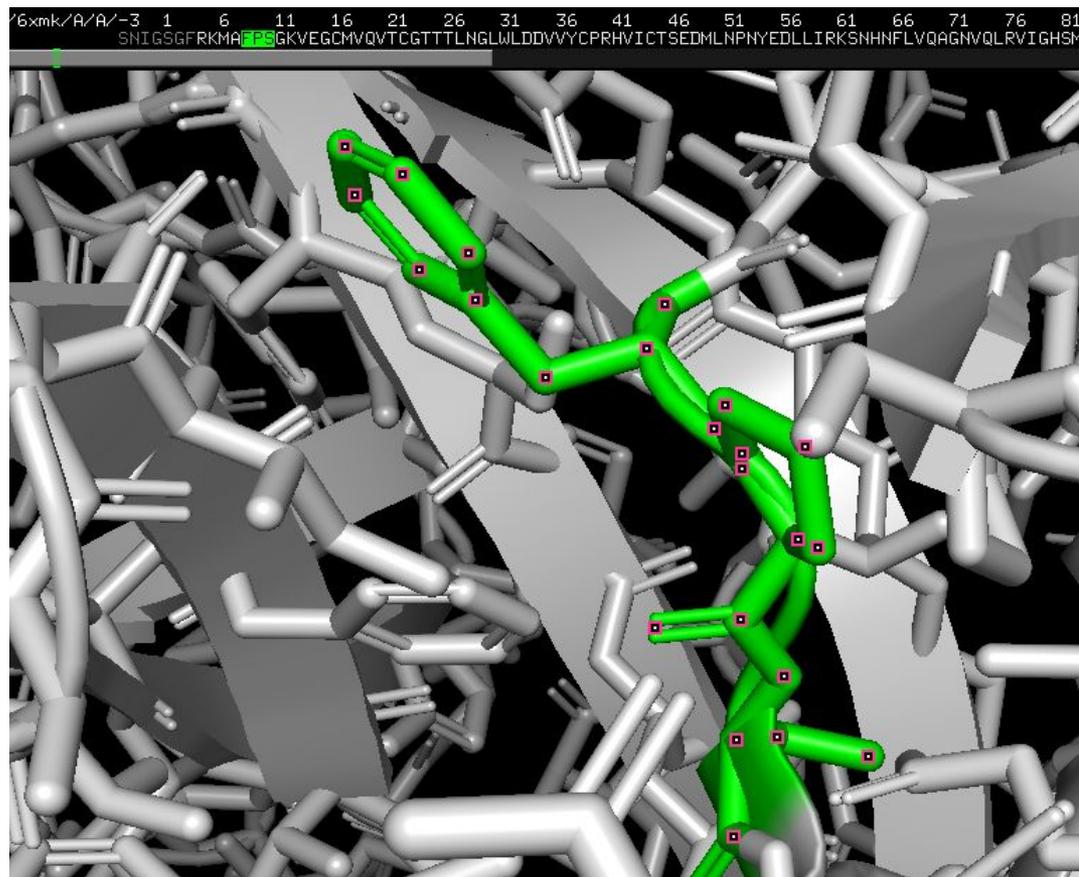
Но его гораздо проще записать

Показ последовательности

Очень полезная опция.
Включается по щелчку на S в
панели внизу справа.



Можно выделять остатки щелчком по
буквам в последовательности.
Сейчас в (sele) находятся
атомы остатков 8, 9 и 10



Отображения и раскраска (CLI)

```
show <representation>, <selection or object>
```

```
hide <representation>, <selection or object>
```

```
color <color>, <selection or object>
```

[Список доступных именных цветов](#)

Сделать свой именной цвет по значениям RGB:

```
set_color <color name>, [15, 76, 129]
```

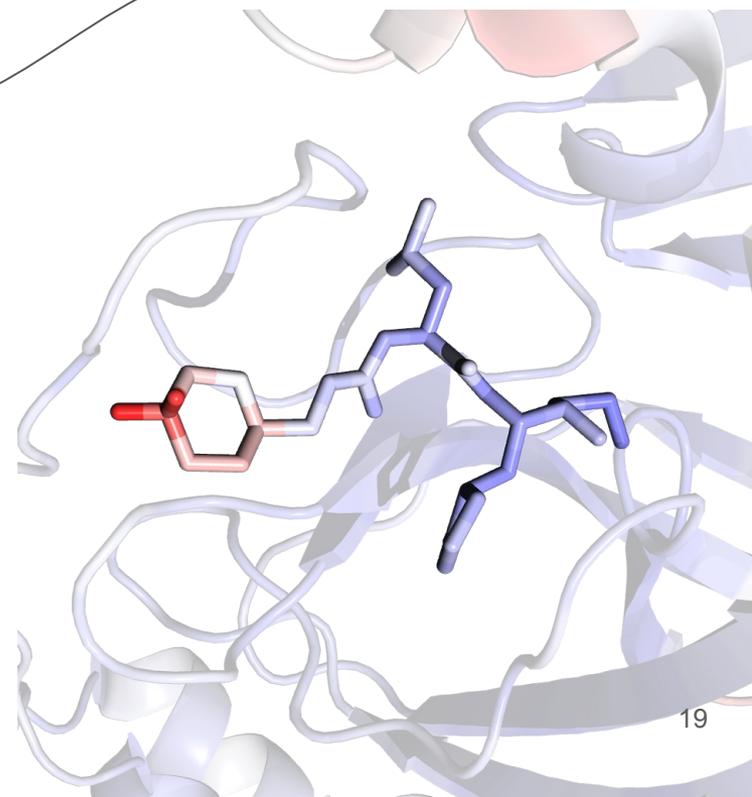
Покраска по B-фактором:

```
spectrum b, blue_white_red
```

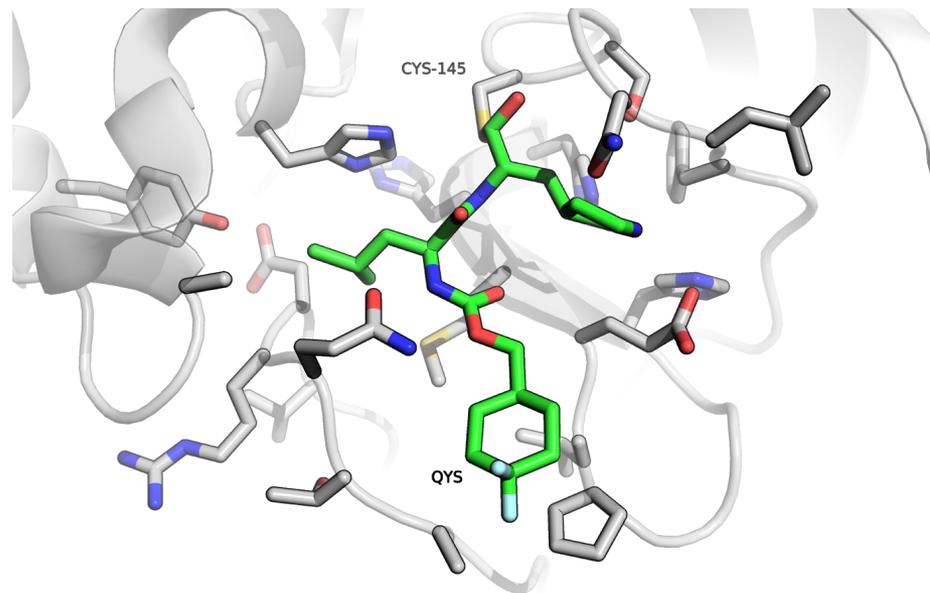
Можно задавать кастомную цветовую схему, минимальное и максимальное значение шкалы. См [spectrum](#).

PANTONE 2020

19 4052 - Classic Blue

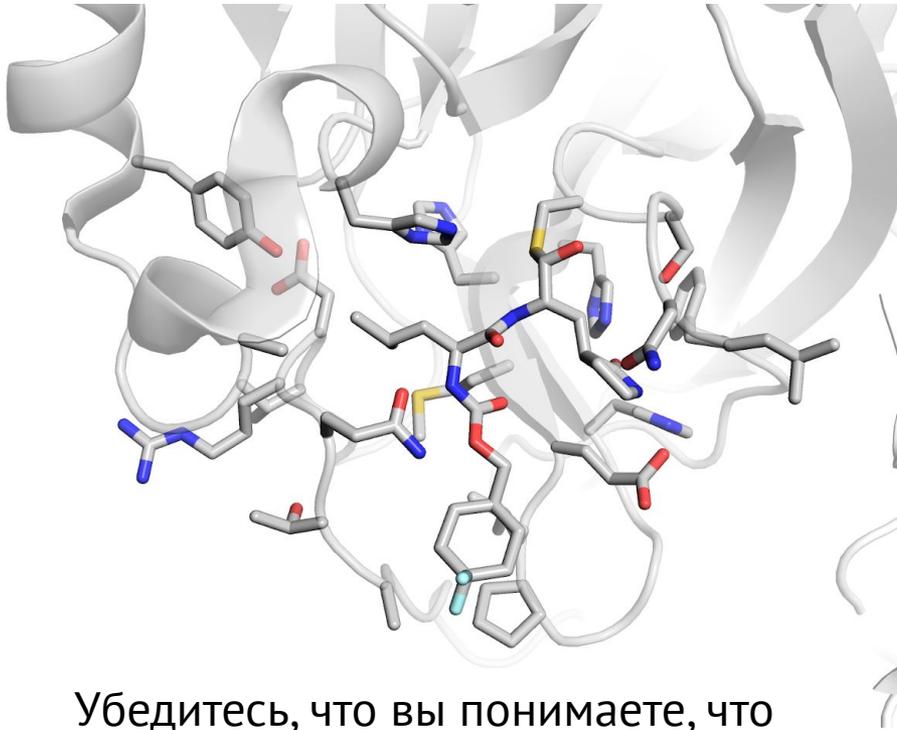


Задание 1



Чтобы сделать картинку с прошлого слайда, понадобились следующие команды и немного манипуляций мышкой и GUI

После команд:



Убедитесь, что вы понимаете, что делают команды из первых двух абзацев

```
fetch 6xmk  
hide everything  
bg_color white  
show cartoon, all  
color gray80, element C  
color white, chain B
```

```
select ligand, chain A and resn  
QYS
```

```
select site, byres all within 5  
of ligand
```

```
show sticks, ligand
```

```
show sticks, site
```

```
orient site
```

```
set cartoon_side_chain_helper, 1
```

```
set cartoon_transparency, 0.5
```

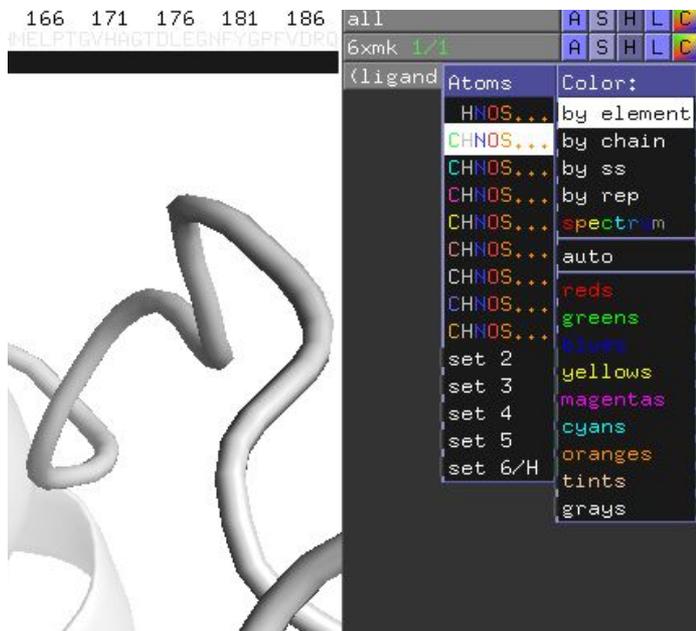
```
set ray_trace_mode, 1
```

```
ray
```

Руками я немного подправил ракурс, а также перекрасил лиганд и добавил подписи.

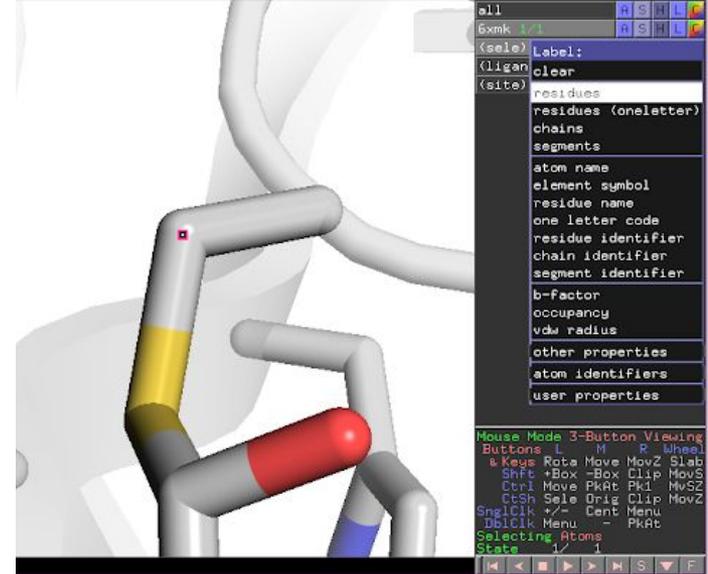
Покраска лиганда:

(ligand) > C > by element > вторая строчка

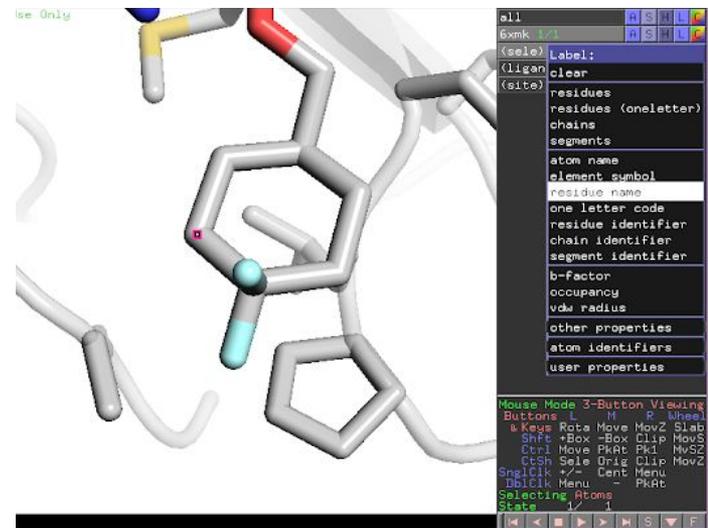


Подписи:

Щелчок по атому серина > (sele) > L > residues



Щелчок по атому лиганда > (sele) > L > residue name



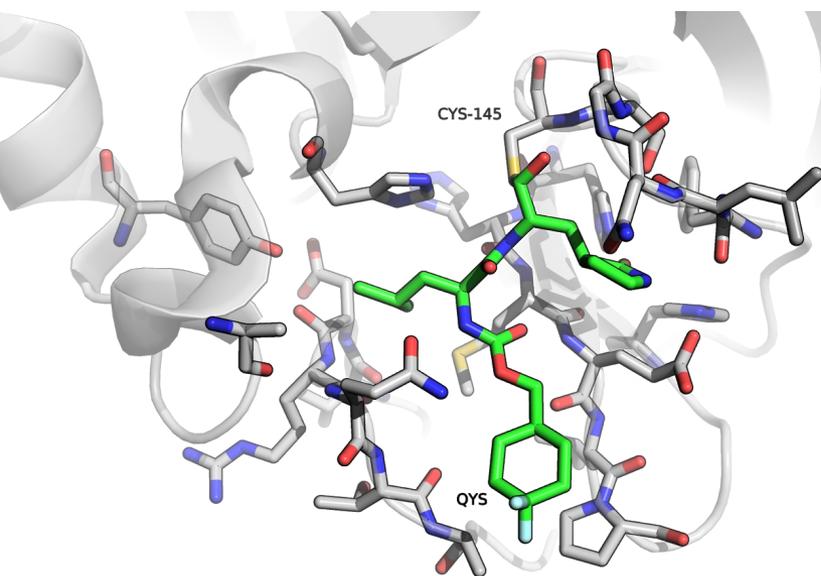
Подписи будут некрасиво наслаиваться на атомы, а еще они мелковаты.

Задать размер: `set label_size, 30`

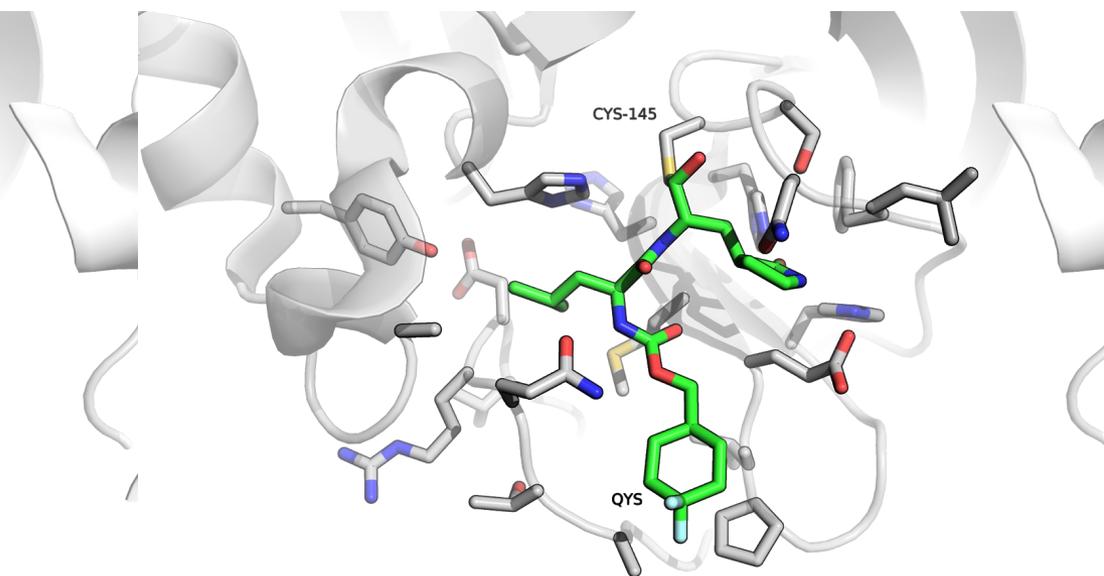
Переместим их: щелчок по режиму Mouse Mode сменит его на Editing. Теперь Ctrl+ЛКМ позволит двигать отдельные атомы и подписи.

А о чем были последние три настройки?

`set cartoon_side_chain_helper, 0`



`set cartoon_side_chain_helper, 1`

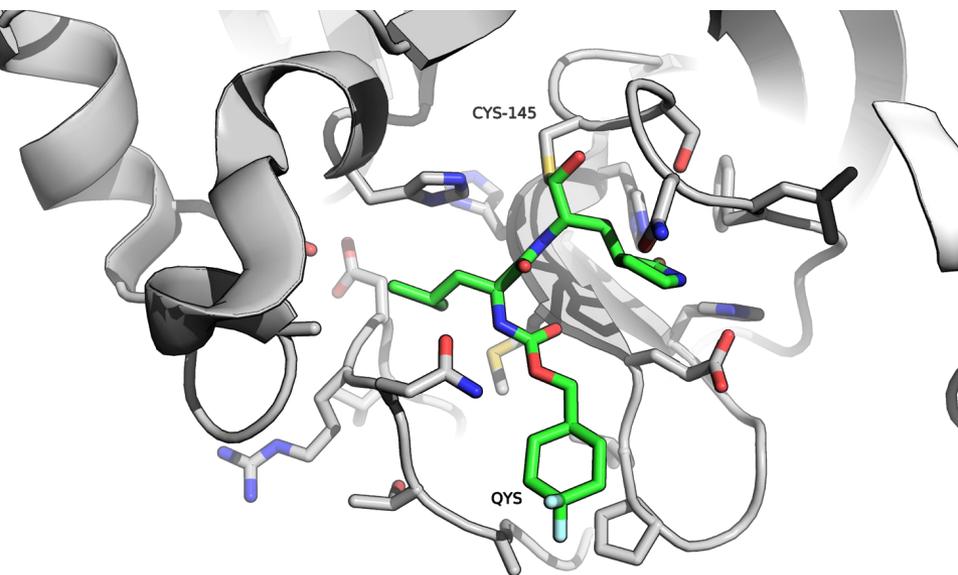


Эта настройка при одновременном отображении cartoon и stick скрывает атомы остова. Это позволяет сделать картинку чище и читаемей. Ее же можно найти в Setting > Cartoon > Side Chain Helper

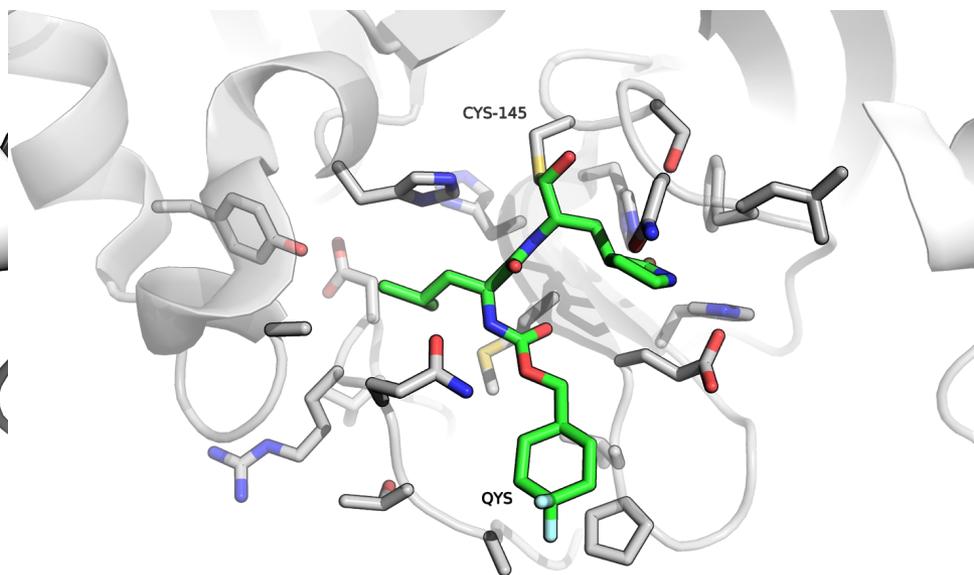
Иногда все же нужно показать какие-то отдельные атомы остова, например, когда они явно участвуют в изучаемом феномене. Тогда можно локально скрыть cartoon для конкретного остатка. Общее правило для структурных иллюстраций – **показывать только то, что нужно для понимания сообщения.**

Transparency

`set cartoon_transparency, 0`



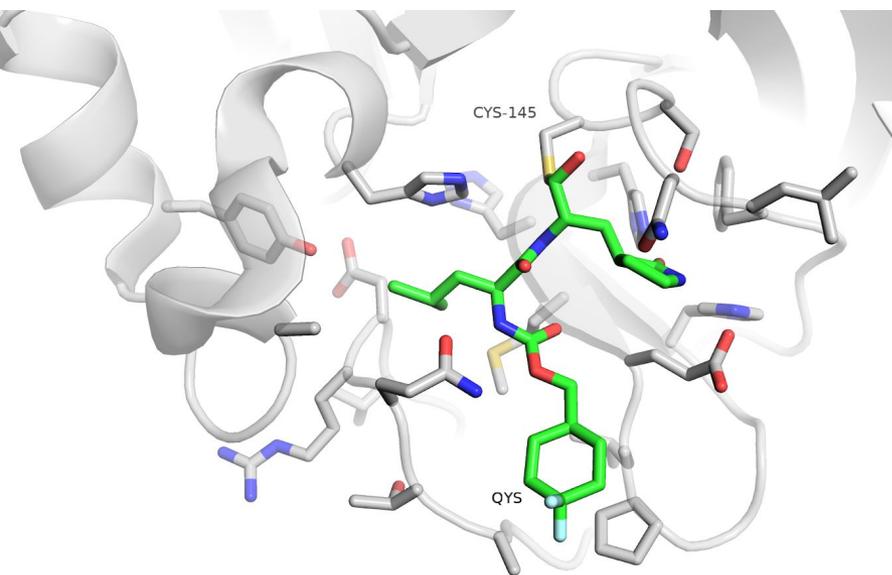
`set cartoon_transparency, 0.5`



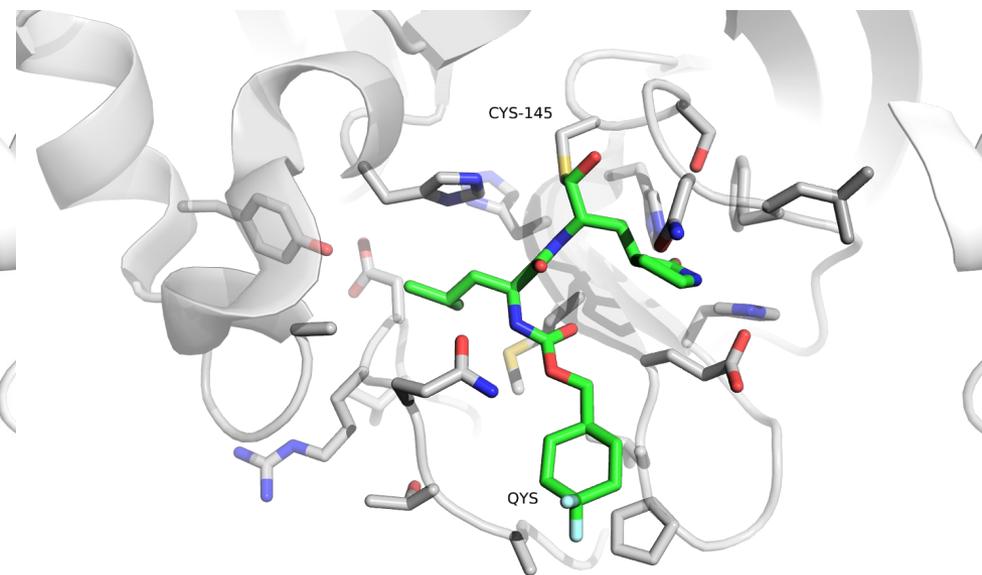
Прозрачность. Есть варианты выставить прозрачность для каждого типа отображения. Для surface нужно просто `set_transparency`. Можно выставить из меню: Setting > Transparency
Прозрачность часто нужна **для разграничения между более важным и менее важным** в рамках одной иллюстрации. Также прозрачность позволяет одновременно показывать и поверхность белка, и то, что под ней находится.

Ray tracing

Команда **draw** или File > Export Image As > Draw antialiased OpenGL image



Команда **ray** или File > Export Image As > Ray trace with ...



Draw добавляет сглаживание. Ray добавляет тени, текстуру, сглаживание. Больше настроек в Setting > Rendering. **Никогда не приводите принтскрины в своих отчетах и, тем более, статьях!**

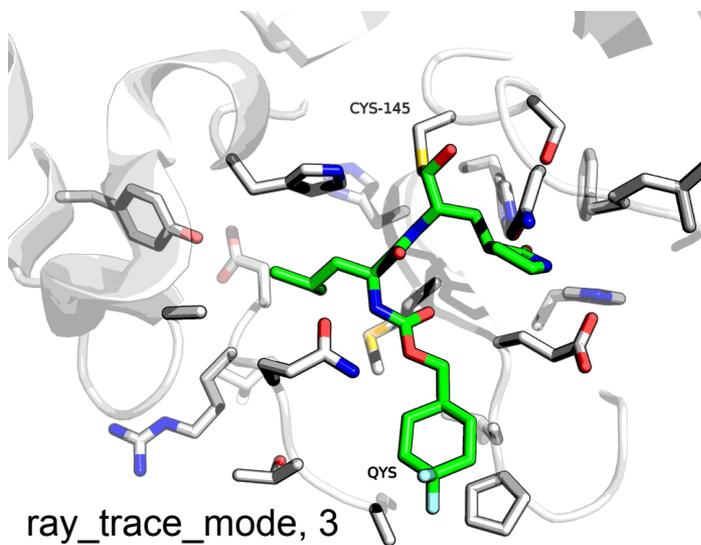
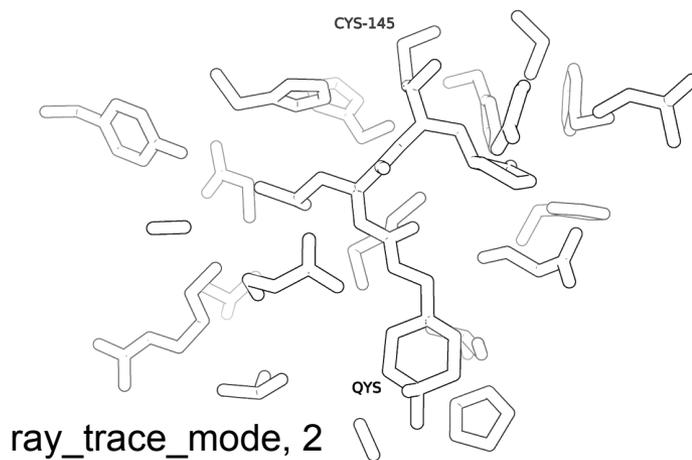
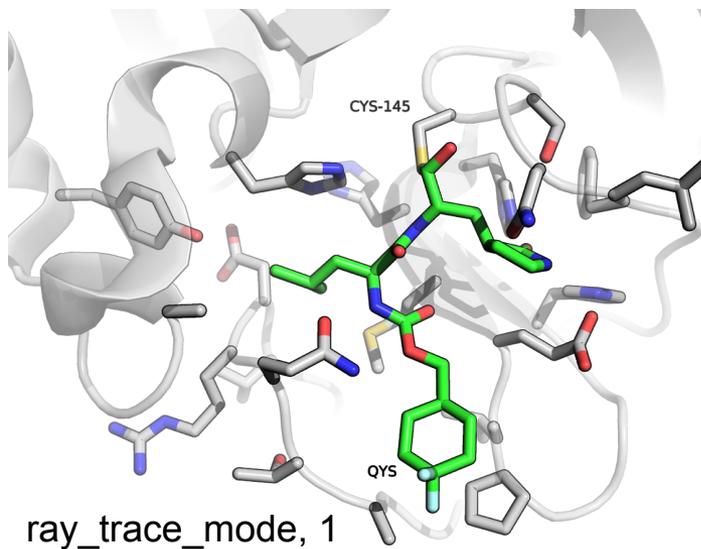
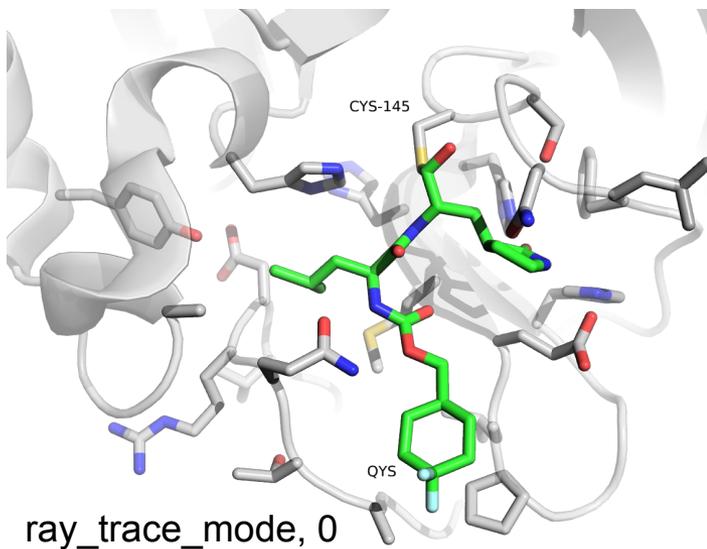
Ray и draw могут подготовить изображение нужного размера:

ray 2000 – 2000 пикселей по горизонтали

ray 3440,1440 – 3440 по горизонтали, 1440 по вертикали

После завершения рендеринга File > Export Image As > Capture Current Display или команда png <path_to_file.png>

Ray tracing



Пространство для творчества

Setting > Edit all показывает все, что можно настроить.

[Примеры того, что можно сделать](#)

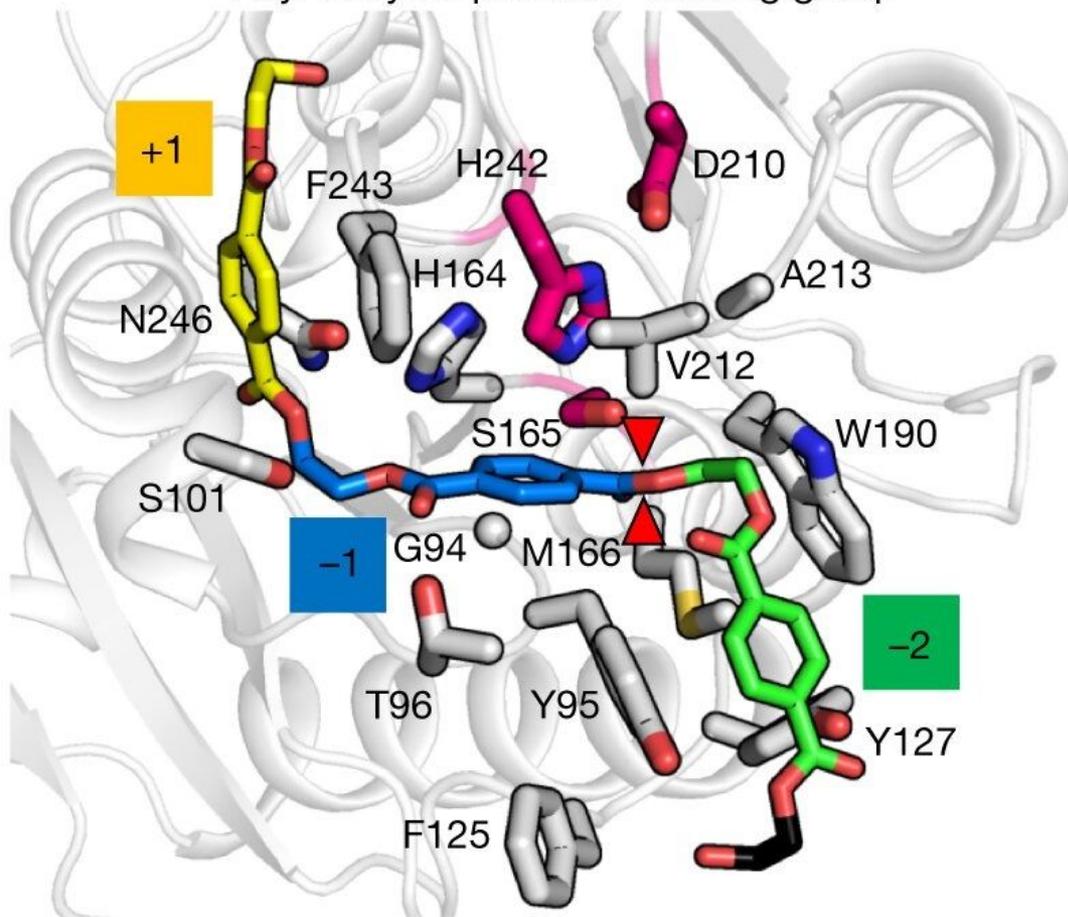
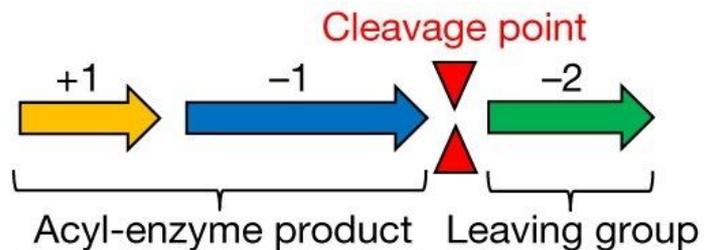
Также не забывайте про **Tab** (автодополнение команды). **Esc** переключает с вида молекулы на терминал. Внутри rmol работают команды bash: **pwd, ls, cd...**

Полное состояние сцены можно сохранить в виде rmol сессии:

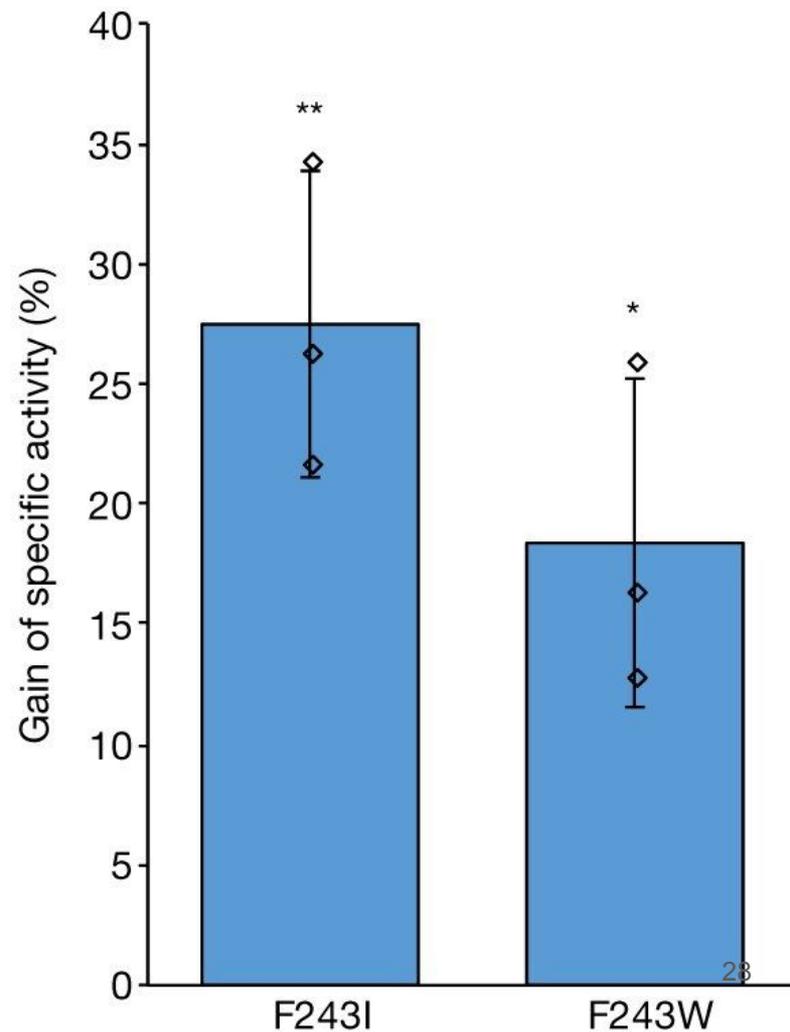
File > Save Session As

Удачное отображение

a



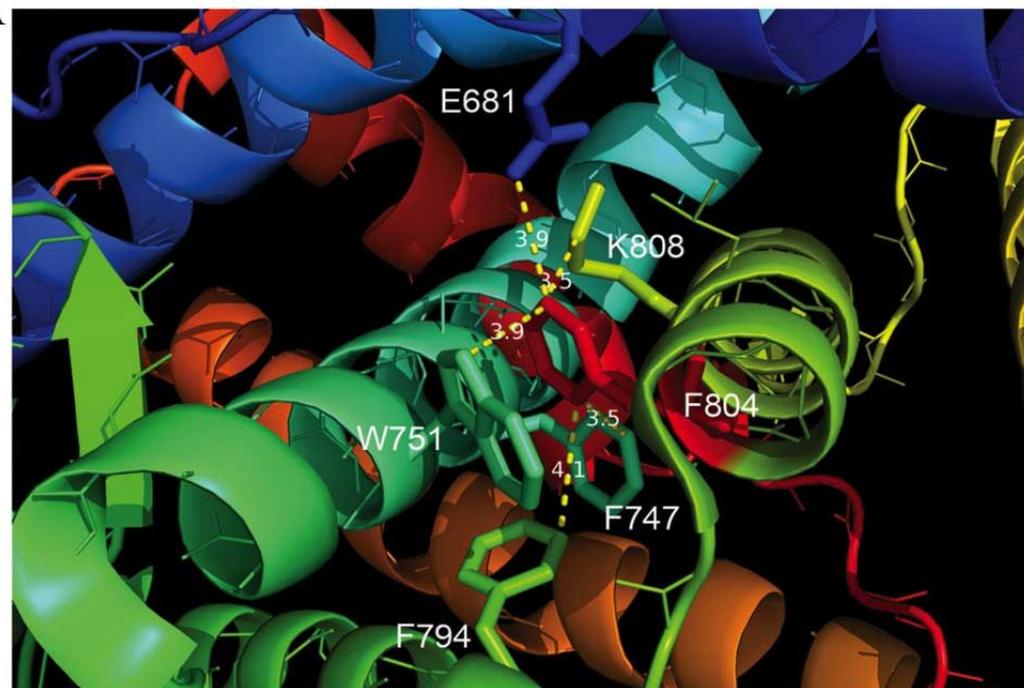
b



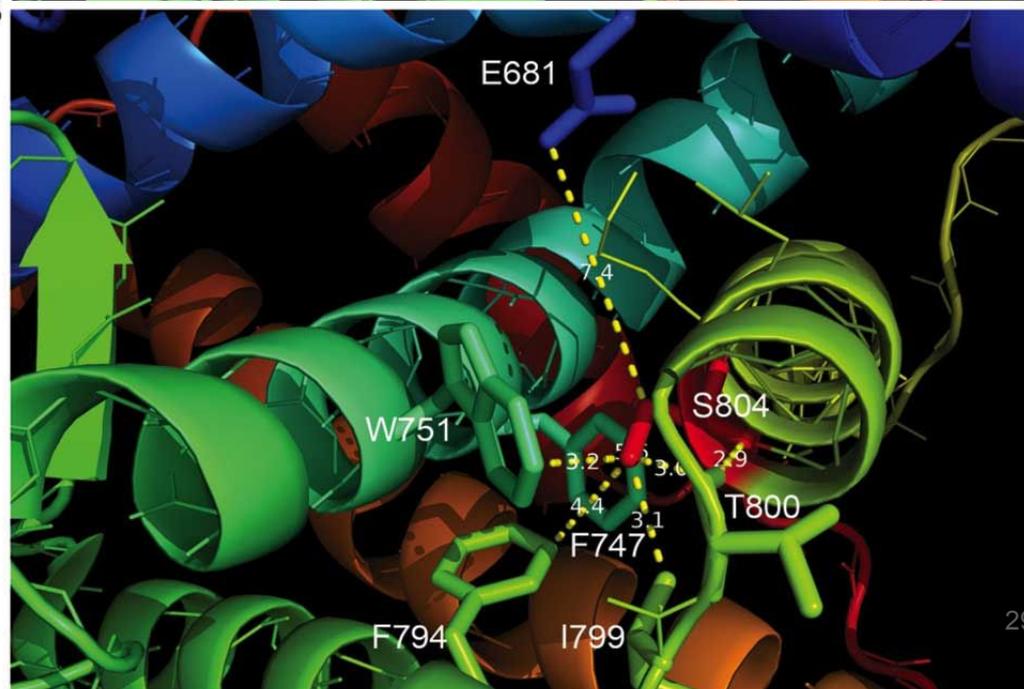
Не очень удачное отображение

Много лишнего

A

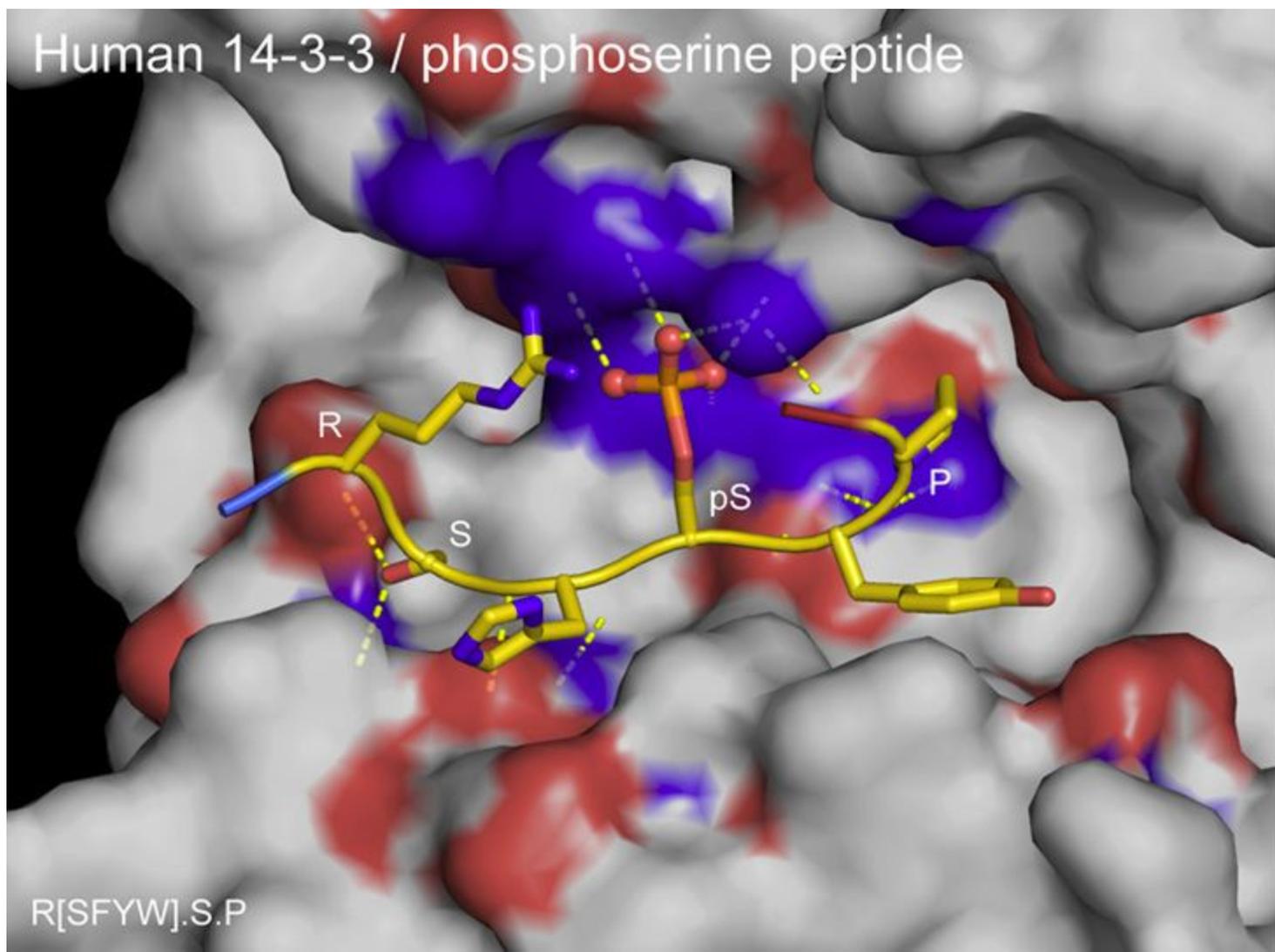


B



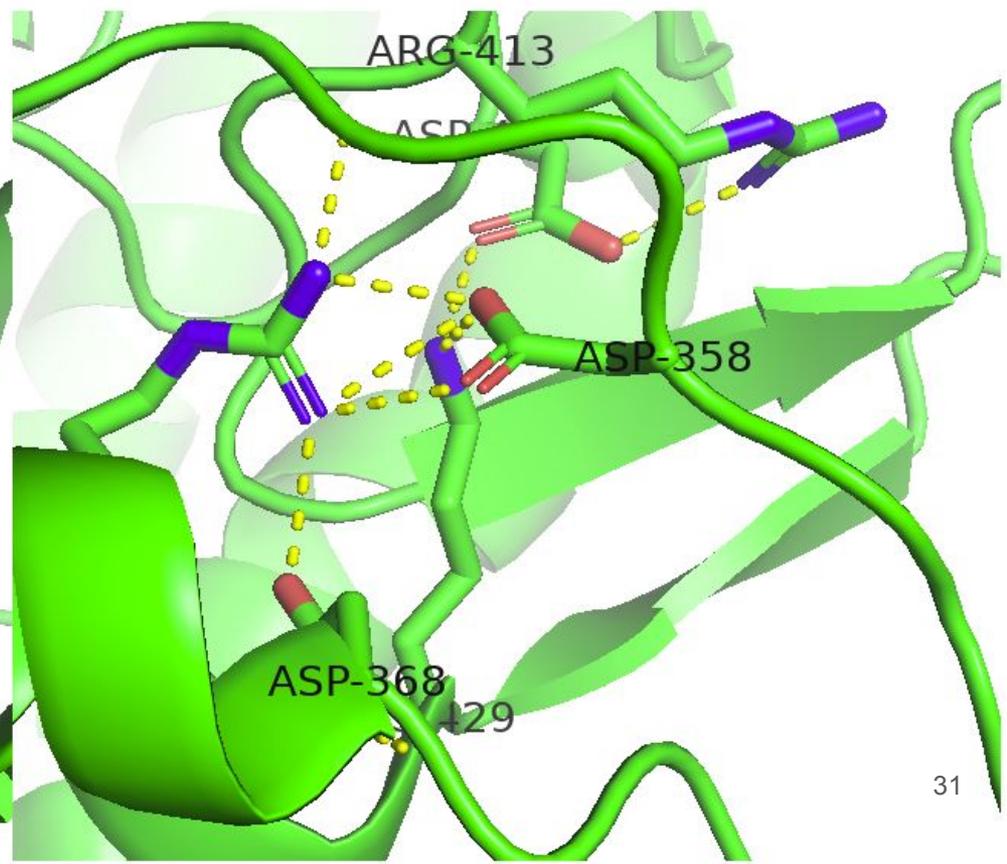
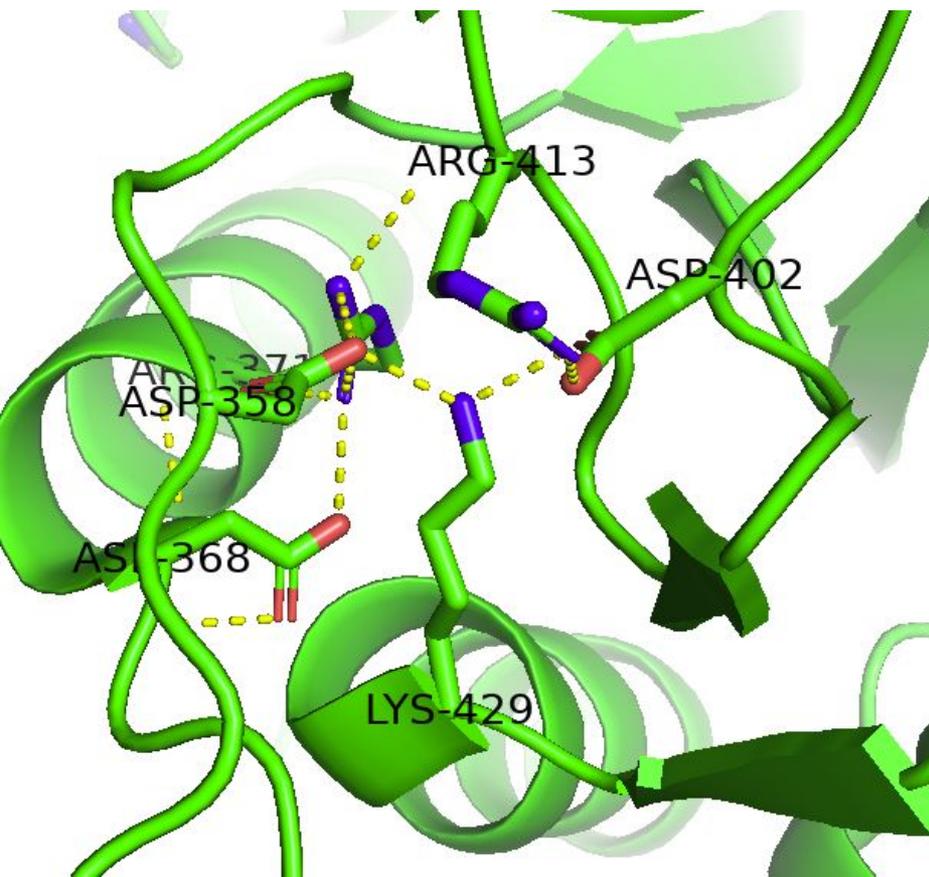
Неудачное отображение

О чем эта история? С чем показаны взаимодействия?

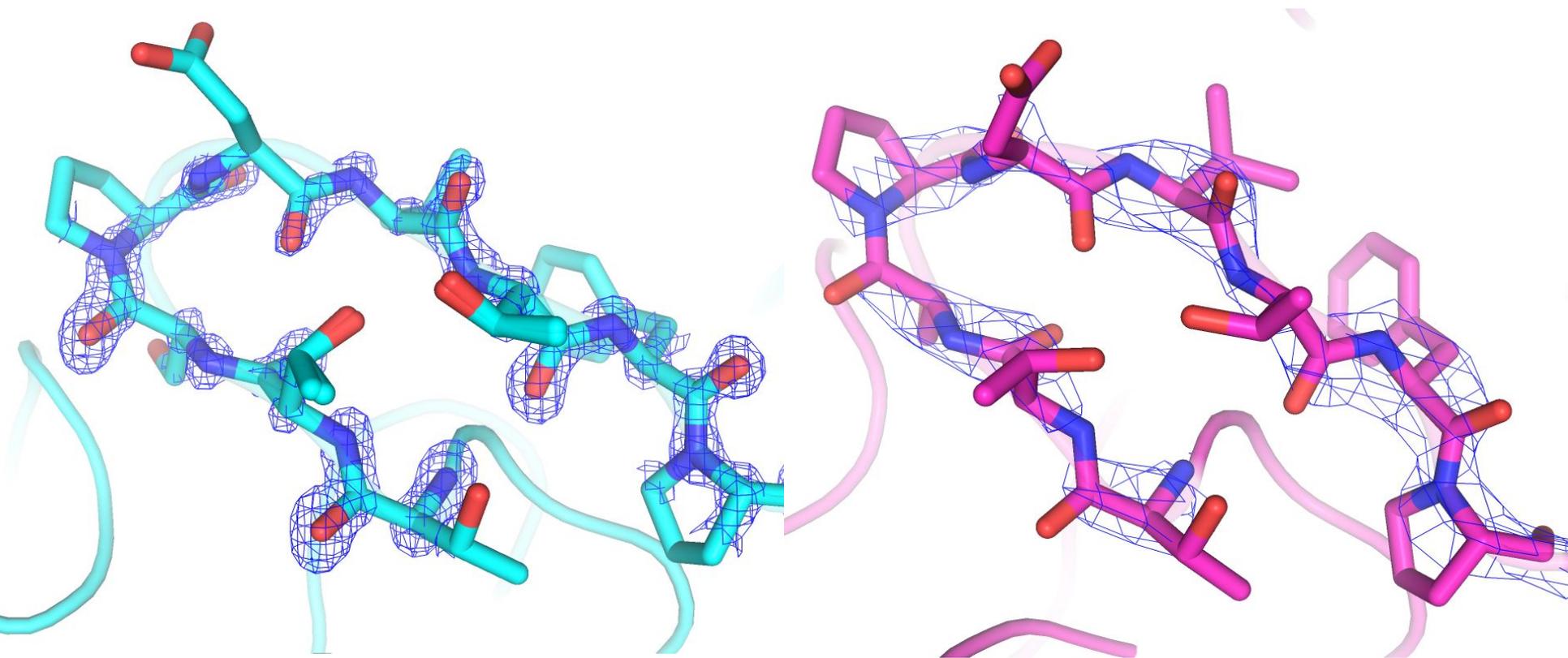


Неудачное отображение

О чем эта история? Подписи заслонены

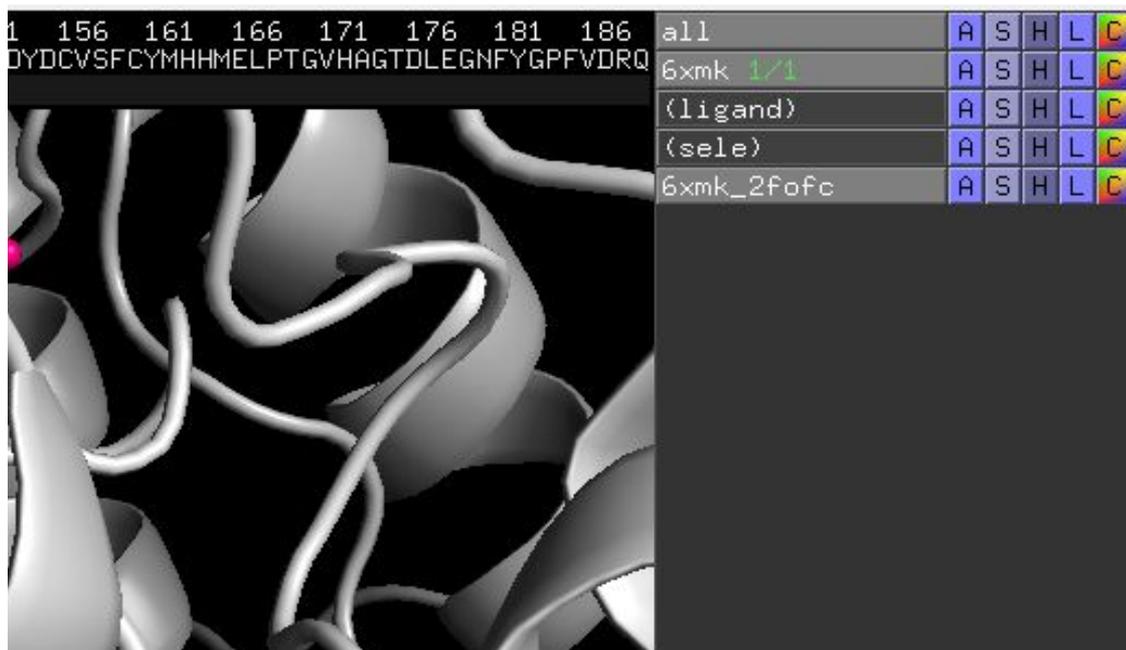


Задание 2, 3, 4



Загрузка электронной плотности (2fo- f_c)

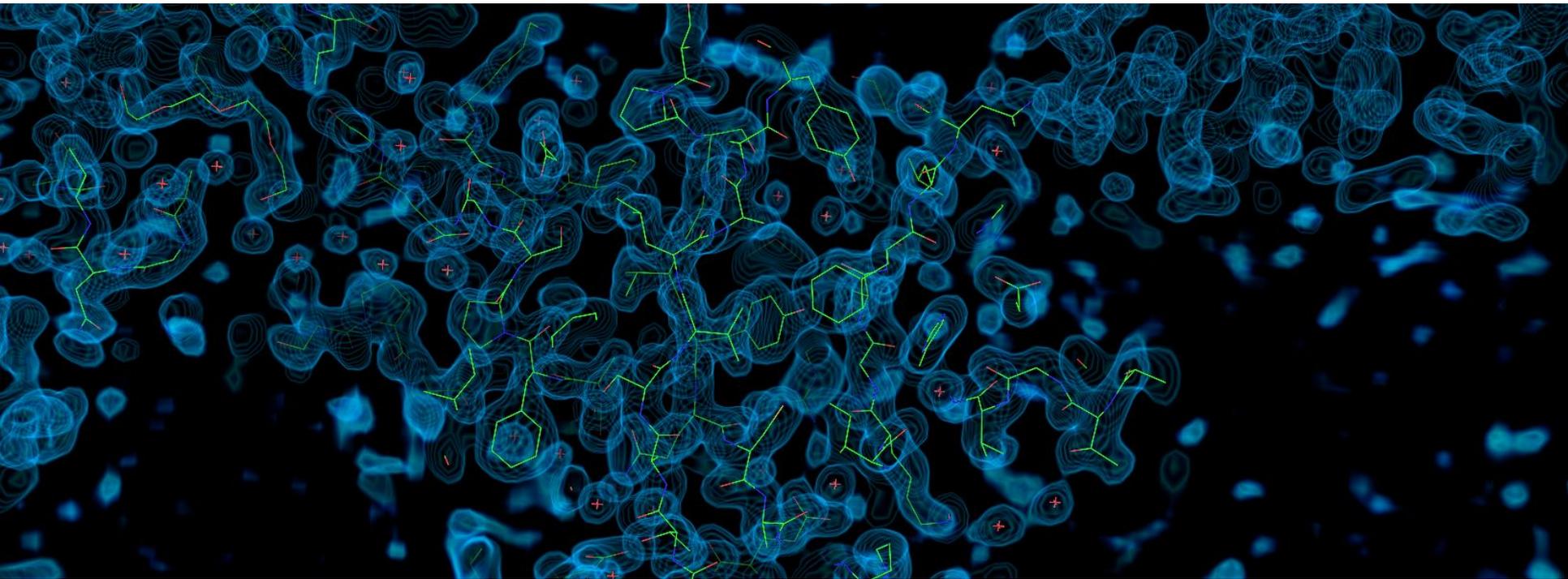
1. Скачать файл в формате DSN6 с сайта PDB, открыть через File > Open или через команду load
2. Воспользоваться File > Get PDB...
3. Воспользоваться командой fetch ..., type=2fofc



Volume

бхmk > A > volume > default

Красиво*, но не информативно. Ray не работает на volume'ах - используйте draw.
Зато видна плотность соседей по кристаллу и границы ячейки, из которой он целиком составлен.



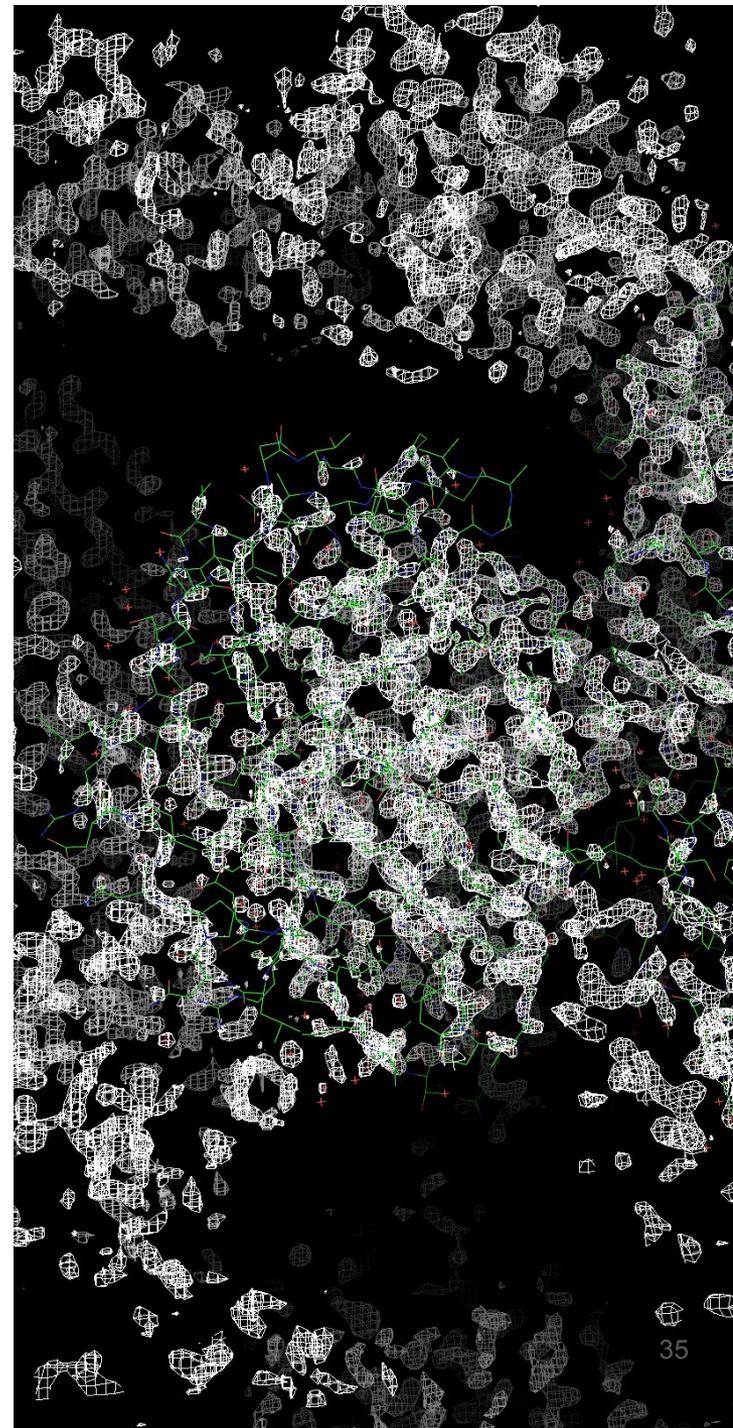
*если у вас хорошая видеокарта, поиграйтесь с настройками числа уровней – можно получить очень гладкие облачка

Mesh

Более информативно отображение поверхности уровня в виде сетки (mesh). Оно же всегда используется в публикациях.

A > mesh > @ level 3.0 показывает поверхность уровня 3, т. е. отсекает те области пространства, внутри которых Z-скор плотности выше или равен 3, т. е. это ~0.15% самых “плотных” областей.

6ХМК довольно хорошая расшифровка, и таких областей много, что значит, что исходные данные достаточно полны, чтобы добиться такого различия между сигналом и шумом.



Причесываем mesh

Построение mesh через GUI быстро, но грязно – построение идет для всего объекта. Иногда хочется добиться более определенного отображения, например, показать только ту плотность, по которой в дальнейшем были воссозданы координаты только атомов остова. Нам нужна команда **isomesh**

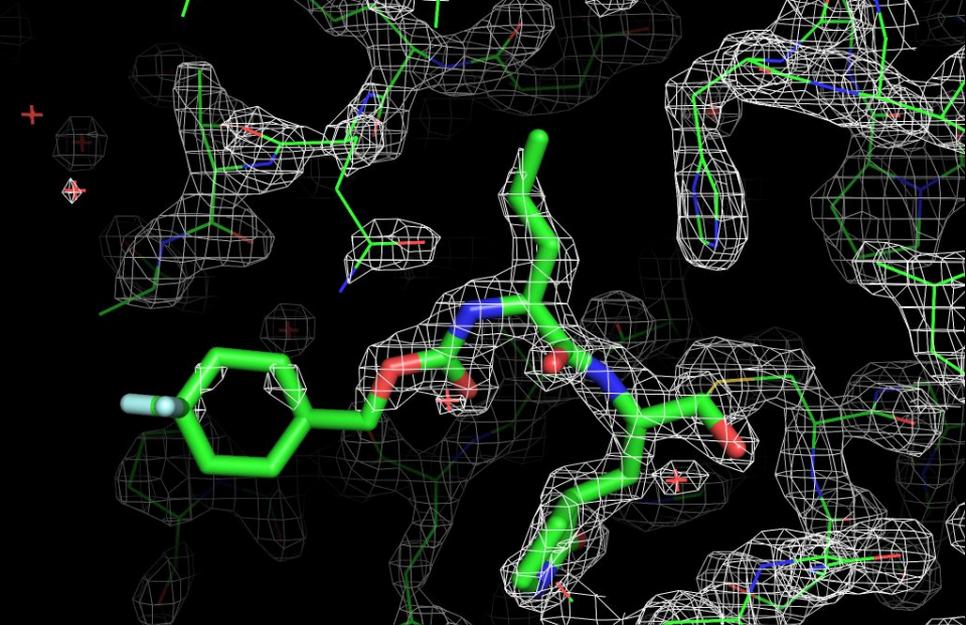
isomesh <имя будущего объекта>, <исходная карта>, <уровень подрезки>, <выделение>

Построит сетку внутри прямоугольника, задаваемого выделением (для построения прямоугольника будут взяты крайние атомы в выделении)

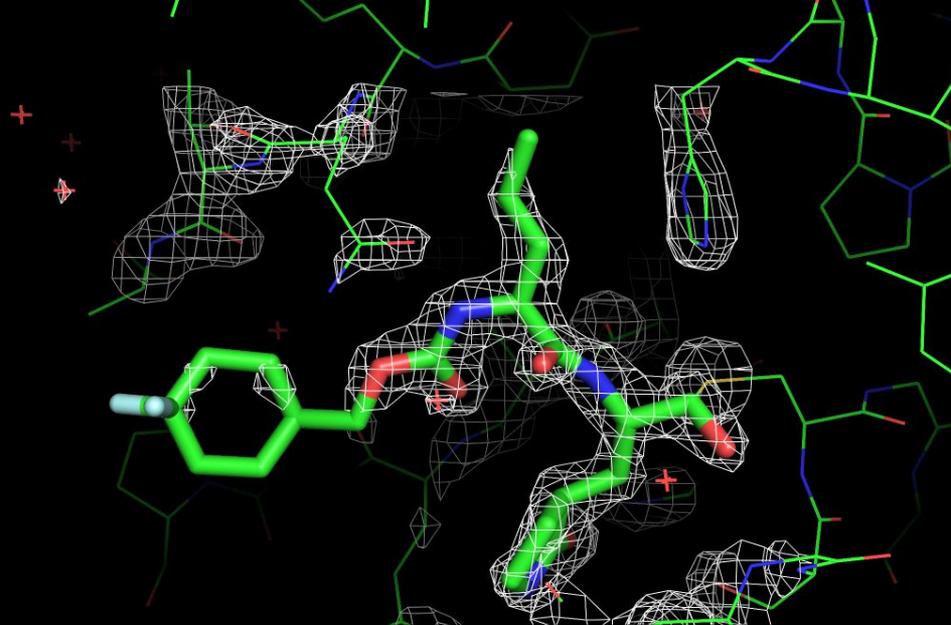
Прямоугольник можно увеличить, добавив аргумент **buffer=...**

Чтобы построить сетку не внутри прямоугольника, а **непосредственно вокруг выделения**, нужно добавить аргумент **carve=...**

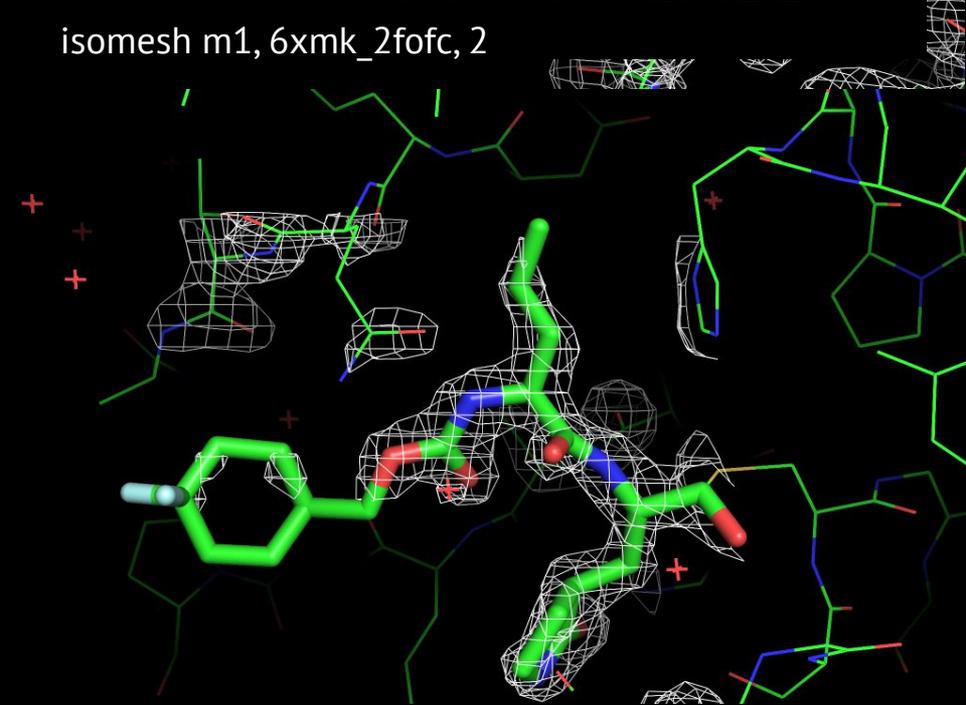
Дальше будут примеры!



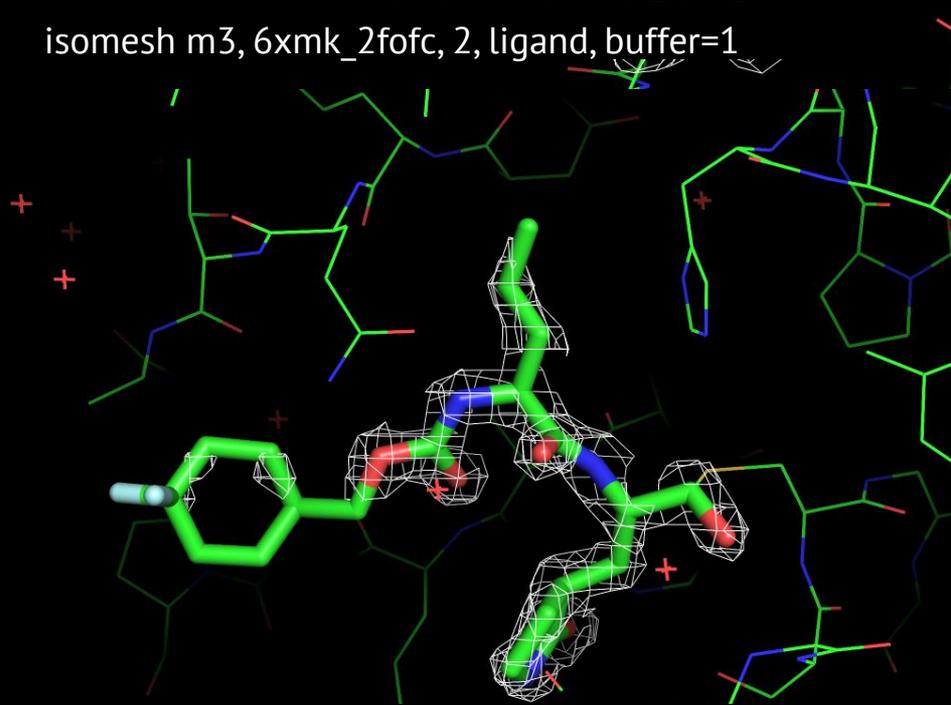
isomesh m1, 6xmk_2fofc, 2



isomesh m3, 6xmk_2fofc, 2, ligand, buffer=1

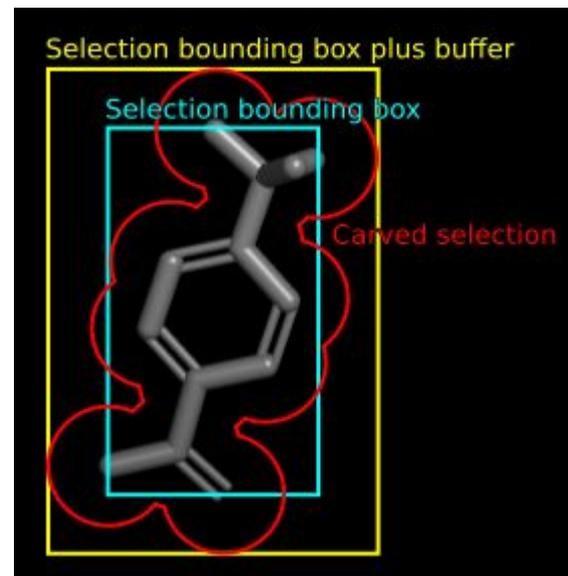


isomesh m2, 6xmk_2fofc, 2, ligand



isomesh m2, 6xmk_2fofc, 2, ligand, carve=1

carve позволяет сосредоточиться на конкретных регионах пространства и сделать незаграможденную картинку. Используйте его в задании 2! Но будьте осторожны с выбором значения – слишком маленькое может оставить без рассмотрения области с все еще значимой плотностью от изучаемого остатка:



Подсказка из PyMol Wiki

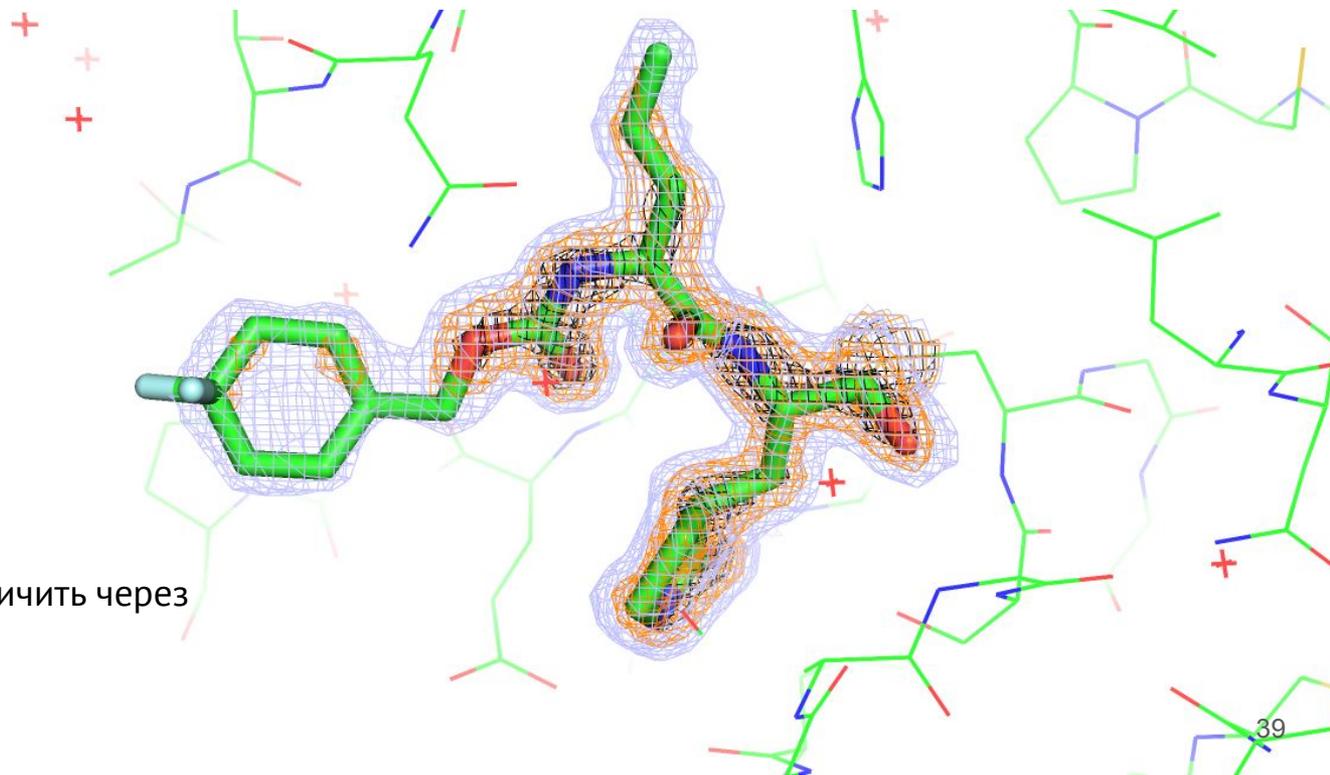
isomesh m2, 6xmk_2fofc, 2, ligand, carve=1

isomesh m2, 6xmk_2fofc, 2, ligand, carve=2

Пространство для творчества

Ray работает с mesh, но вряд ли вам понравится результат (попробуйте!). Лучше использовать draw.

Можно одновременно показать сетки для разных уровней подрезки и покрасить их в разные цвета:



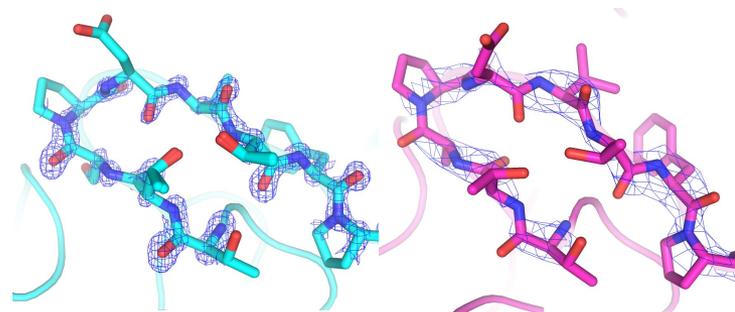
Плотность сетки можно увеличить через
`map_double 6xmk_2fofc`
Следите за RAM!

Что я сделал:

```
fetch 2QXI
fetch 2QXI, type=2fofc
fetch 3BSQ
fetch 3BSQ, type=2fofc
hide everything
show cartoon
select loop1, 2qxi and chain A and resi 144-152
select loop2, 3bsq and chain A and resi 138-146
isomesh 2QXI_mesh, 2qxi_2fofc, 2, loop1 and
backbone, carve=1.5
isomesh 3BSQ_mesh, 3bsq_2fofc, 2, loop2 and
backbone, carve=1.5
show sticks, loop1 or loop2
set cartoon_transparency, 0.8, loop1 or loop2
color blue, *mesh
bg_color white
```

```
orient loop1
disable 3BSQ*
draw
```

```
enable 3BSQ*
disable 2QXI*
orient loop2
draw
```



я воспользовался показом последовательности, чтобы найти соответствующий участок во второй структуре – как видите, нумерация различается. Альтернативно можно бы было посмотреть на последовательность 144-152 в первой структуре и сделать `select loop2, 3bsq and chain A and perseq TTSPDVTFP`

на самом деле помимо `orient` я выбирал ракурс руками, но вас может устроить и тот, что получается с помощью `orient`

Не забывайте про смену якорной точки и настройку `fog` с помощью колесика